



**INSTYTUT KATALIZY
I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI
im. JERZEGO HABERA
POLSKIEJ AKADEMII NAUK**



**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2013**



Kraków, luty 2014

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2013	9
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2013	15
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2013	21
Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący	21
Działalność statutowa Instytutu	43
Projekty badawcze MNiSW	55
Projekty badawcze promotorskie MNiSW	83
Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"	59
Projekty badawcze NCN "Sonata"	63
Projekty badawcze NCN "Opus"	71
Projekty badawcze NCN "Preludium"	87
Projekty badawcze NCN "Harmonia"	95
Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"	99
Projekty MNiSW "Mobilność Plus"	105
Projekty FNP "Pomost"	109
Projekty strategiczne NCBiR	113
Projekty badań stosowanych NCBiR	117
Projekty NCBiR "Lider"	121
Projekty 7. Programu Ramowego UE	125
Projekty Akcji COST UE	131
Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej	135
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	139
Inne międzynarodowe projekty badawcze	149
Inne zadania	153
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2013	157
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	157
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	195
Raport Międzynarodowego Panelu – International Advisory Board, za lata 2012-2013	229
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	233

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA POLSKIEJ AKADEMII NAUK

Od teorii do eksperymentu i zastosowań

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk jest jedyną w Polsce instytucją naukową i jedną z niewielu w świecie, które specjalizują się wyłącznie w badaniach w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni. W Instytucie prowadzi się interdyscyplinarne badania zjawisk zachodzących na granicach fazowych gaz–ciało stałe, gaz–ciecz i ciecz–ciało stałe, łączące istotne aspekty chemii, fizyki, technologii chemicznej, inżynierii materiałowej, a ostatnio także – biologii i medycyny. Prowadzone w Instytucie podstawowe studia teoretyczne i doświadczalne łączą się z badaniami o charakterze stosowanym, mającymi zastosowanie w procesach technologicznych.

W Instytucie zatrudnionych jest ponad 120 pracowników, z których 90 zajmuje stanowiska związane bezpośrednio z prowadzeniem prac badawczych. W badaniach uczestniczy ponadto kilkudziesięciu doktorantów.

Działalność badawcza Instytutu obejmuje cztery podstawowe kierunki:

1. Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju
2. Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria
3. Nanostruktury materii miękkiej
4. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

W zakresie katalizy kładzie się nacisk na rozwijanie nowych, „inteligentnych” materiałów o dobrze zdefiniowanej strukturze i właściwościach dostosowanych do konkretnych reakcji katalitycznych. Procesy katalityczne stanowiące przedmiot badań wpisują się w nurt „zielonej chemii” i są optymalizowane pod kątem obniżenia energochłonności i eliminacji lub ograniczenia produktów ubocznych. Katalityczne działanie enzymów i ich syntetycznych mimetyków jest dynamicznie rozwijanym zakresem badań. Użycie metod teoretycznych i eksperymentalnych pozwala opisać mechanizmy katalitycznego działania badanych układów na poziomie molekularnym i opracowywać użyteczne biokatalizatory.

Głównym celem prac badawczych w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych jest opis zjawiska adsorpcji oraz wyjaśnienie mechanizmu tworzenia i stabilności pian, nanocząstek i cząstek koloidalnych, a także ich oddziaływań, procesy mikroenkapsulacji i biokompatybilności materiałów.

Prace eksperymentalne prowadzi się w ścisłym związku z badaniami teoretycznymi, w których stosuje się metody chemii kwantowej jako narzędzie określania i charakteryzowania czynników elektronowych i strukturalnych mających wpływ na ukierunkowanie i selektywność procesów chemicznych w celu wyjaśnienia mechanizmów katalitycznych reakcji heterogenicznych i enzymatycznych. Wykorzystywane jest także modelowanie z wykorzystaniem metod fizyki ciała stałego, jak również metody mechaniki molekularnej i techniki symulacji Monte Carlo.

Rezultatem prowadzonych badań są osiągnięcia aplikacyjne obejmujące katalizatory i procesy katalitycznego usuwania zanieczyszczeń środowiska, wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych oraz udoskonalanie materiałów i metod służących ochronie zabytków. Przykładem mogą być badania podstawowe opisu mechanizmu adsorpcji protein na powierzchniach międzyfazowych mające istotne potencjalne znaczenie dla zastosowań w procesach rozdziału i oczyszczania białek, produkcji efektywnych testów immunologicznych i reakcjach enzymatycznych w bioreaktorach

Instytut posiada bardzo dobre, a w niektórych przypadkach unikatowe w skali krajowej, zaplecze aparaturowe. W badaniach wykorzystuje się także aparaturę wspólnych laboratoriów międzyinstytutowych.

W 2012 roku dokonaliśmy analizy naszej struktury organizacyjnej i wprowadziliśmy nowy podział na 13 grup badawczych i 2 laboratoria, który w lepszym stopniu odzwierciedla kluczowe, szczególnie nowe, pola zainteresowań badawczych Instytutu:

- Adsorpcja
- Badania nad dziedzictwem kultury
- Biokataliza teoretyczna i eksperymentalna
- Chemia kwantowa - badania katalizatorów i reakcji katalitycznych
- Funkcjonalizowane sita molekularne
- Kataliza kwasowo-zasadowa
- Kataliza w ochronie przyrody
- Koloidy
- Minerale ilaste, tlenki mezoporowate, nanostruktury
- Nanostruktury materii miękkiej
- Procesy katalityczne dla czystej energii
- Układy zdyspergowane
- Laboratorium dyfrakcji rentgenowskiej i termooanalizy
- Laboratorium nanostruktur powierzchniowych

Kształcenie

Instytut prowadzi studia trzeciego stopnia - studia doktoranckie w ramach trzech struktur:

- Międzynarodowych Studiów Doktoranckich (MSD), działających w porozumieniu z Wydziałem Chemicznym Politechniki Rzeszowskiej.
- Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich (ISD) "Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości" koordynowanych przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH i działających w porozumieniu z Instytutem Fizyki Jądrowej PAN.
- Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich (MOL-MED), "Nauki Molekularne dla Medycyny", działających w porozumieniu z Instytutem Farmakologii PAN, Wydziałem Chemii UJ i Wydziałem Lekarskim Collegium Medicum UJ.

W 2013 roku 5 doktorantów ukończyło swoje międzynarodowe projekty doktorskie w programie "Krakow Interdisciplinary PhD-Project in Nanoscience and Nanostructures" prowadzonym we współpracy z Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH.

W ramach współpracy z uczelniami wyższymi w Instytucie powstają prace licencjackie i magisterskie z dziedziny chemii i ochrony środowiska.

Współpraca krajowa i międzynarodowa

Instytut szczeni się wieloletnią tradycją w organizacji i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni w Polsce. Od ponad czterdziestu lat organizuje coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne cieszące się wielką popularnością w środowisku naukowym.

Dla rozwoju interdyscyplinarnych badań Instytut utworzył wspólne laboratoria z wieloma instytucjami badawczymi: Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur, Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej, Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni, Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych

i Medycznych, Narodowe Laboratorium Badania Powierzchni oraz Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej SPINLAB.

Instytut, mając na względzie interdyscyplinarny rozwój badań, uczestniczy w pracach kilku krajowych sieci i konsorcjów badawczych: Polskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, Krajowego Konsorcjum „Polski Synchrotron”, Klastra Life-Science, Konsorcjum "Kataliza w ochronie środowiska" i Konsorcjum Nanotech.

W lipcu 2012, Instytut otrzymał prestiżowy status Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego KNOW w zakresie nauk fizycznych na okres 2012 – 2017 w ramach Krakowskiego Konsorcjum Naukowego im. Mariana Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" utworzonego wspólnie z Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Wydziałem Chemii UJ, Wydziałem Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ oraz Instytutem Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN.

Instytut prowadzi szeroką współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w licznych porozumieniach o współpracy dwustronnej, projektach badawczych kolejnych Programów Ramowych Unii Europejskiej i Europejskiego Obszaru Gospodarczego, a także Programach Operacyjnych Innowacyjna Gospodarka i Kapitał Ludzki, współfinansowanych przez Komisję Europejską.

Instytut aktywnie uczestniczy w akcjach Inicjatywy COST. W latach 2012-2016 jest koordynatorem akcji COST CM 1101 "Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials" z udziałem 70 organizacji badawczych z 36 krajów.

Popularyzacja nauki

Jesteśmy przekonani, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach naukowych ma wielkie znaczenie w budowaniu aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne. Każdego roku Instytut organizuje Dni Otwarte, podczas których goście mogą wysłuchać wykładów popularnonaukowych, uczestniczyć w ciekawych eksperymentach i zaznajomić się z profilem badawczym jednostki. Dni Otwarte skierowane są przede wszystkim do uczniów szkół ponadpodstawowych. O ich popularności wśród krakowskich szkół świadczy fakt, że corocznie Instytut odwiedza ok. 1000 osób.

Instytut bierze aktywny udział w organizacji corocznego Festiwalu Nauki na Rynku Głównym w Krakowie, a w roku 2013 uczestniczył w Pikniku Naukowym na Stadionie Narodowym w Warszawie, będącym największą w Europie imprezą na otwartym powietrzu promującą naukę, organizowanym przez Centrum Nauki Kopernik i Polskie Radio.

ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2013

Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący (MNiSW)

1. Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. M. Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" [2012-2017] 21

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych 27
2. Nowe perokso- oraz polianionowe związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania 28
3. Procesy fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza - efekty synergiczne 29
4. Synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne bi-kationowych soli heteropolikwasów 30
5. Materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe i modelowanie kwantowo-chemiczne 31
6. Nowe materiały dla wysokotemperaturowych ogniw paliwowych 32
7. Procsy katalityczne z udziałem bio-surowców 33
8. Właściwości strukturalne, elektronowe i dynamika powierzchni i nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni 34
9. Badania nad mechanizmami reakcji katalitycznych niehemowych enzymów utleniających węglowodory 35
10. Dynamika molekularna w badaniach układów biologicznie czynnych 36
11. Przeróbka biomasy: odwodnienie bio-butanolu na katalizatorach tlenkowych 37
12. Rozwinięcie metody wzmocnienia koloidalnego do wyznaczania topologii i właściwości elektrokinetycznych monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe 38
13. Wpływ rozmiarów powstającego filmu ciekłego i ładunku elektrycznego na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o niskiej hydrofobowości 39
14. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe 40
15. Właściwości fizyczne warstw malarskich w warunkach wysokiej wilgotności względnej 41

KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty badawcze MNiSW

1. N N204 026438 [2010-2013] Nowa metoda ilościowego opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych 45
2. N N204269038 [2010-2013] Biokatalityczna synteza chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenowi - teoria i eksperyment 46
3. N N204 269238 [2010-2013] Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami 47

4. N N507 616638 [2010-2013] Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych SOFC pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro	48
5. N N204 546639 [2010-2013] Stabilność, funkcjonalność i mechanizm tworzenia wielowarstwowych struktur polimerowo-kazeinowych	49
6. N N204 205240 [2011-2014] Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego	50
7. N N204 133640 [2011-2014] Wpływ mikro- i nano-pęcherzyków na powierzchniach hydrofobowych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych	51
8. N N204 439640 [2011-2014] Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji transmetylacji porforyny i jej wybranych pochodnych	52
9. N N204 439040 [2011-2014] Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności	53
10. N N209 757340 [2011-2014] Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek	54

Projekty badawcze promotorskie MNiSW

1 N N204 179439 [2010-2014] Wpływ surfaktantów kationowych i PpH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości	57
---	----

Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"

1. ST4 [2013-2017] Wspomagane komputerowo projektowanie i przewidywanie właściwości nośników leków opartych na strukturze nanorurek węglowych	61
---	----

Projekty badawcze NCN "Sonata"

1. HS2 [2011-2014] Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów	65
2. ST5 [2011-2014] Nowe katalizatory Pd-Pt/nanokompozyt hybrydowy do redukcji tlenu w polimerowym ogniwie paliwowym	66
3. ST5 [2011-2014] Funkcjonalizacja filmów polimerowych jako narzędzie do otrzymywania nowoczesnych nanomateriałów o znacznym potencjale aplikacyjnym	67
4. ST4 [2012-2015] Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: modelowanie komputerowe	68
5. ST5 [2012-2017] Wcelowane dostarczanie laków - synteza i funkcjonalizacja nanonośników	69
6. ST4 [2013-2017] Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze <i>Sterolibacterium denitrificans</i>	70

Projekty badawcze NCN "Opus"

1. HS2 [2011-2014] Mechanizm zniszczeń obrazów panelowych z uwzględnieniem struktury przyrostów rocznych drewna i rzeczywistych fluktuacji klimatu	73
2. ST8 [2011-2014] Opracowanie technologii wytwarzania stabilnej i łatwo biodegradowalnej piany ciekłej do zastosowań przemysłowych i biomedycznych	74
3. ST5 [2012-2015] Wpływ gliceryny jako nietoksycznego i biodegradowalnego rozpuszczalnika na mechanizm utleniania fenolu	75

4. ST4 [2012-2014] Monomery tlenków chromu(V), molibdenu (VI) i wolframu (VI) na powierzchni amorficznej krzemionki modyfikowanej glinem. Symulacje periodyczna metodą DFT	76
5. ST4 [2012-2015] Właściwości fizykochemiczne i katalityczne heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment	77
6. ST4 [2012-2016] Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant-polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanonosników	78
7. NZ1 [2012-2015] Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne i obliczeniowe	79
8. ST4 [2013-2016] Badania chemii powierzchni katalizatorów hybrydowych jako droga do wyjaśnienia ich właściwości katalitycznych w wysokociśnieniowej reakcji syntezy eteru dimetylowego z mieszaniny H ₂ /CO ₂	80
9. ST5 [2013-2016] Nanoklastery zeolitów jako podstawa nowych warstwowych materiałów porowatych do procesów katalitycznych w fazie ciekłej	81
10. ST5 [2013-2016] Projektowanie, synteza i charakterystyka fizykochemiczna katalizatorów rutenowych oraz ich zastosowanie w reakcji uwodornienia prochiralnych ketonów	82
11. ST4 [2013-2016] Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór	83
12. ST4 [2013-2016] Określenie mechanizmów adsorpcji wybranych białek anizotropowych w kontrolowanych warunkach transportu	84
13. ST5 [2013-2016] Struktura i właściwości warstw białkowych: od biomolekuły do funkcjonalnej warstwy (badania eksperymentalne i symulacje)	85

Projekty badawcze NCN "Preludium"

1. ST4 [2011-2013] Modelowanie aktywności katalitycznej nanostruktur biologicznych na przykładzie wybranych dioksygenaz zależnych od żelaza	89
2. ST5 [2012-2013] Wpływ stopnia utlenienia metali nieszlachetnych w układach Au-Me-O/TiO ₂ na oddziaływanie miedzy nanocząstkami złota a nosnikiem	90
3. ST5 [2012-2014] Synteza biogodnych nanośników dla wybranych substancji neuroprotektynnych	91
4. ST4 [2013-2015] Udoskonalenie metody detekcji nadtlenu wodoru po przez modyfikację nanocząstek błękitu pruskiego polimerami przewodzącymi oraz zredukowanym tlenkiem grafenu	92
5. ST5 [2013-2016] Wielowarstwowe filmy polimerowe zawierające nanocząstki oraz grafen jako funkcjonalne powłoki i membrany	93
6. ST5 [2013-2015] Charakterystyka elektrokinetyczna oddziaływań monowarstw HSA rekombinowanego z ligandami jonowymi	94

Projekty badawcze NCN "Harmonia"

1. ST4 [2013-2015] Obrazowanie lokalnej kinetyki reakcji katalitycznych dla układów modelowych w skali mezo- i nanoskopowej	97
---	----

Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"

1. [2012-2013] Wybrane aspekty oddziaływań pomiędzy kwasami α -L-gulonowym, β -D-mannuronowym a dwuwartościowymi jonami metali	101
2. [2012-2014] Nowa metoda syntezy zoli srebra i mechanizm oddziaływania nanocząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy zjawisk elektrokinetycznych oraz metod: AFM, mikroskopii fluorescencyjnej i QCM-D	102
3. [2013-2015] Zaawansowane badania teoretyczne nad reakcją mutarotacji D-glukopiranozy	103

4. [2013-2015] Magnetyczne systemy dostarczania leków z możliwością sterowanego uwalniania czynnika aktywnego **104**

Projekty MNiSW "Mobilność Plus"

1. [2011-2012] Czynniki determinujące stabilność ciekłych filmów powstających w warunkach dynamicznych na powierzchniach ciecz-gaz i ciecz-ciało stałe **107**

Projekty FNP "Pomost"

1. [2011-2014] Selektywna hydrogenoliza gliceryny do glikoli *via* aceton na katalizatorach heterogenicznych zawierających metale i tlenki metali **111**

Projekty strategiczne NCBiR

1. [2012-2015] Projektowanie katalizatorów do rekombinacji wodoru i tlenu pod kątem kontroli ich aktywności jako czynnika o krytycznym znaczeniu dla bezpieczeństwa pracy rekombinatorów w instalacjach nuklearnych **115**

Projekty badań stosowanych(NC BiR)

1. [2013-2016] HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych (MN) **119**

Projekty NCBiR "Lider"

1. [2012-2015] Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej **123**

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty 7. Programu Ramowego UE

1. EC 7th FP NEXT-GTL [2008-2013] Innovative Catalytic Technologies & Materials for Next Gas to Liquid Processes (IP) **127**
2. EC 7th FP [2009-2013] F³ Factory Flexible, Fast and Future Factory - European Chemistry Consortium Begins the Journey into the Future of Production (IP) **128**
3. EC 7th FP [2012-2015] NANOIES Nanotechnology Education for Industry and Society (CSA) **129**
4. EC 7th FP HYPERCONNECT [2013-2015] Functional Joining of Dissimilar Materials Using Directed Self-assembly of Nanoparticles by Capillary-bridging (CP) **130**

Projekty Akcji COST UE

1. EC COST CM1101 [2011-2015] Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials **133**

Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej

1. [2013-2016] NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies against Neurodegenerative Diseases (core) **137**
2. [2013-2015] FUNCLAY Synthesis and Functionality of Innovative Porous Clay Hybrid Nanostructures (small grant) **138**

Projekty Funduszy Strukturalnych UE

1. SPO IG 1.1.2 [2008-2013] MPD Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures **141**
2. PO KL 4.1.1 [2009-2015] ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości **142**
4. PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym **143**
5. PO IG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO Funkcjonalne nano- i mikrocząsteczki – synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach **145**
6. PO IG 2.1.1 [2009-2014] VOX Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych **146**
7. PO KL 4.1.1 [2010-2015] ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny **147**

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. [2013-2015] Organo-Clays as Intermediates for the Synthesis of Functional Hybrid Materials (projekt współpracy PAN - AN Słowacji) **151**
2. [2013-2014] Polyoxometalates Immobilized on Mesoporous Silicas for Selective Oxidation of Alkanes and Alkenes (projekt współpracy PAN-NANU) **152**

INNE ZADANIA

1. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ **155**
2. Węglowe ogniwa paliwowe z elektrolitem ze stopionych węglanów (DC-MCFC) **156**

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2013

W ROKU 2013:

realizowano:	15 statutowych zadań badawczych 47 projektów badawczych (grantów) MNiSW, NCBiR, NCN, FNP (w tym 7 promotorskich) 4 projekty 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej 1 projekt UE COST Action 2 projekty Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej 2 inne projekty międzynarodowe 6 projektów Funduszy Strukturalnych UE
opublikowano:	12 rozdziałów w monografiach 114 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy Journal Citation Reports (lista A) (oraz 14 ogłoszonych elektronicznie) 2 publikacje w czasopismach recenzowanych z listy MNiSW (lista B) 9 publikacji w innych w czasopismach oraz w pismach popularno-naukowych 18 prac w recenzowanych materiałach konferencyjnych 244 streszczenia referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	1 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wyłożono i zaprezentowano:	123 referaty i komunikatów (w tym 21 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 214 posterów
uzyskano:	2 patenty
dokonano:	3 zgłoszeń patentowych
we współpracy z zagranicą:	realizowano 23 tematy opublikowano 37 wspólnych prac w czasopismach naukowych (oraz 2 ogłoszone elektronicznie) ogłoszono 29 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 18 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę
zorganizowano:	3 konferencje i posiedzenia naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki stoisko na 18. Pikniku Naukowym w Warszawie
tytuł profesora:	uzyskała 1 osoba
stopień doktora habilitowanego:	uzyskały 4 osoby
stopień doktora:	uzyskało 9 osób

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2013

Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych, lotnych związków organicznych

(Ewa Serwicka, Tadeusz Machej, Łukasz Mokrzycki, Roman Dula, Alicja Michalik-Zym, Daria Napruszewska, Małgorzata Zimowska)

projekt POIG.01.01.02-12-065/06 VOX

Opracowano technologię otrzymywania dwóch formuł skutecznych i niedrogich monolitowych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych z toksycznych gazów i par organicznych. Wysoką aktywność i selektywność katalizatorów potwierdziły testy w skali półtechnicznej w instalacji pilotowej. Oba katalizatory tlenkowe są znacznie tańsze od katalizatorów opartych na metalach szlachetnych. Uzyskane wyniki posłużyły do przygotowania dwóch zgłoszeń patentowych.

Monowarstwy fibrynogenu na powierzchniach stałych - określenie konformacji, stabilności oddziaływań z ligandami koloidalnymi

(Zbigniew Adamczyk, Monika Wasilewska, Anna Bratek-Skicki, Małgorzata Nattich-Rak, Paulina Żeliszewska)

Dokonano pełnego opisu zjawisk adsorpcji białek globularnych (fibrynogen, immunoglobuliny) na powierzchniach międzyfazowych przy użyciu oryginalnych metod teoretycznych oraz nowych metodyk eksperymentalnych, działających w warunkach *in situ*. Wyjaśnienie mechanizmów tych zjawisk umożliwiło min. sformułowanie nowej izotermy adsorpcji, wychodzącej poza granice powszechnie stosowanego modelu Langmuira, nieadekwatnego w przypadku cząsteczek anizotropowych. Uzyskane wyniki mają też znaczenie praktyczne dla efektywnego prowadzenia testów immunologicznych oraz reakcji enzymatycznych.

Polielektrolitowe nanokapsułki jako nośniki leków

(Krzysztof Szczepanowicz, Marek Piotrowski, Karolina Podgórna, Tomasz Kruk, Piotr Warszński)

Opracowano nową metodę wytwarzania nanoonośników dla substancji hydrofobowych. Metoda ta polega na bezpośredniej enkapsulacji kropli nanoemulsyjnych w polielektrolitowych powłokach przy użyciu techniki sekwencyjnej adsorpcji polielektrolitów. Otrzymano nanoonośniki substancji aktywnych (m.in. leków: MDL 28170, Paclitaxel, Clozapina) oraz przeprowadzono badania aktywności *in-vitro* enkapsulowanych leków. Badania wykazały przydatność otrzymanych nanokapsulek jako nośników wybranych leków.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2013:

W roku 2013 zorganizowano 3 konferencje i posiedzenia naukowe, Dzień Otwarty Instytutu, stoiska na Krakowskim Festiwalu Nauki i 18. Pikniku Naukowym w Warszawie (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 19 października 2012

Główną ideą zorganizowania w dniu 7 listopada 2013, corocznego, ósmego z kolei Dnia Otwartego Instytutu było przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych jest niezbędnym warunkiem budowania aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne.

W imprezie wzięło udział około 800 osób. Odwiedzający mieli okazję wysłuchać następujące wykłady:

- J.Barbasz "Małe jest wielkie - czyli o technologiach 'nano', które zdominowały świat"
- Ł.Bratasz "Cement Romański - czyli z czego Kraków zbudowano"
- E.Jarek "Nanochemia - świat, w którym powierzchnia jest najważniejsza"
- D.Rutkowska-Żbik "Magia dotyku - jak działają ekrany dotykowe"
- M.Szaleniec "Czekoladowa Chemia"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Mikro- i nano-świat widziany w mikroskopie skaningowym
- Światło i barwy
- Owocowe baterie
- Reakcje autokatalityczne - rozkład wody utlenionej
- Kolorowy świat mieszanin
- W kolorowym świecie barwników
- Kolory chemii
- Krystalizacja a odkrycia Marii Skłodowskiej-Curie
- Temperatura, ciśnienia i my
- Chemia od kuchni
- Konwertery energii
- Spektakularne eksperymenty chemiczne

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 13-15 marca 2013 (B.Sulikowski)
- International SPR Workshop "New Dimensions in Life Sciences", Kraków, April 12th 2013 (B.Jachimska)
- HEREDITAS Centre Workshop "Identification, Conservation and Protection of Art Works Made of Polymeric Materials" ARTPLAST, Kraków, December 4th-5th, 2013 (M.Łukomski)

Organizacja imprez popularno-naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- Festiwal Nauki "Oblicza wody", Rynek Główny, Kraków 15-18 maja 2013 (M.Derewiński)
- 18. Piknik Naukowy, Stadion Narodowy, Warszawa, 15 czerwca 2013 (M.Strojecki)

– Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 7 listopada 2013 (M.Nattich-Rak)

KRAJOWY NAUKOWY OŚRODEK WIODĄCY

1. Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. Mariana Smoluchowskiego "Materia-Energia-Przyszłość"



Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący MNiSW [2012-2017]

(koordynator: prof. Małgorzata Witko)

Instytut otrzymał w lipcu 2012 roku w ramach Krakowskiego Konsorcjum Naukowego im. Mariana Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" status Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego KNOW w zakresie nauk fizycznych na okres 2012 – 2017. Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. Mariana Smoluchowskiego tworzą Wydział Chemii UJ, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN oraz Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN.

W okresie sprawozdawczym Instytut podjął szereg przedsięwzięć dla zintensyfikowania wspólnych badań pracowników instytucji członkowskich Konsorcjum. Przyznano, w drodze konkursu, 10 grantów wspomagających wspólne projekty pracowników Instytutu z badaczami z instytucji partnerskich obejmujących różną tematykę:

1. "Rozkład odkształceń wewnątrz makroskopowej próbki drewna poddanej zmianom wilgotności" (dr L.Krzemień)
2. "Fononowe właściwości epitaksjalnych warstw FeO na Pt(111)" (dr hab. N.Spridis)
3. "Połączenie analizy FTIR i MAS NMR jako efektywna metoda badania struktury kompozytów na osnowie krzemianów warstwowych i mezoporowatej krzemionki" (prof. E.Serwicka-Bahranowska)
4. "Badania nad strukturą i dynamiką miejsca wiążącego metale w dioksygenazach acireduktonu" (dr hab. T.Borowski prof. IKiFP PAN)
5. "Określenie mechanizmu ultrastabilizowania zeolitu typu Y zaawansowanymi metodami spektroskopowymi (NMR i IR) i teoretycznymi (DFT)" (prof. B.Sulikowski i prof. E.Brocławik)
6. "Leki antynowotworowe nowej generacji: układ hybrydowy kobalamina-cis-platyna" (dr D.Rutkowska-Żbik)
7. "Badanie wpływu warunków syntezy na morfologię, porowatość oraz pojemność elektryczną nanostrukturalnych materiałów węglowych jako potencjalnych materiałów elektrodowych" (dr A.Pacuła)
8. "Badania struktury i właściwości superparamagnetycznych nanocząstek tlenku żelaza w odniesieniu do ich zastosowań biomedycznych" (dr hab. T.Pańczyk prof. IKiFP PAN)
9. "Elektrochemiczny monitoring hodowli mikroorganizmów" (dr hab. P.Weroński prof IKiFP PAN)
10. "Syntetyczne biodegradowalne materiały polimerowe: Zastosowanie nowej klasy nanohybryd: metaloporfiryna-heteropolizwiązek do otrzymania kaprolaktanu" (dr J.Połtowicz)

Przyznano 12 rocznych stypendiów doktoranckich "Smoluchowski Doctoral Scholarships" szczególnie utalentowanym słuchaczom studium doktoranckiego Instytutu.

Rozpoczęło działalność Centrum HERITIDAS stawiające sobie za cel konsolidację środowiska akademickiego w zakresie badań nad ochroną dziedzictwa kulturalnego. Pierwszym działaniem Centrum była organizacja w Krakowie dwudniowego spotkania eksperckiego "Identyfikacja, konserwacja i ochrona dzieł sztuki z tworzyw polimerowych" dla przygotowania programu badań we wniosku o grant planowanym wspólnie przez IKiFP PAN i Wydział Chemii UJ.

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych

*(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Elżbieta Bielańska, dr Roman Dula,
dr Dorota Duraczyńska, dr Robert Karcz, dr Alicja Michalik-Zym,
dr Małgorzata Zimowska, mgr inż. Daria Napruszewska)*

Celem badań było otrzymanie kompozytu zbudowanego z eksfoliowanego/delaminowanego anionowego minerału warstwowego typu hydrotalkitu oraz kationowego minerału warstwowych typu montmorillonitu.

Do badań wybrano wapniową formę montmorillonitu z Jelšovego Potoku (Słowacja) oraz syntetyczny hydrotalkit magnezowo-glinowy. Oba minerały zostały przeprowadzone w formy organopochodne, przez wprowadzenie do ich struktury na pozycje wymienne odpowiednio: anionu dodecylosiarczanowego (DDS) $C_{12}H_{25}SO_4^-$ i kationu decylotrimetyloamoniowego (DTMA) $C_{10}H_{21}N(CH_3)_3^+$. Celem takiej wymiany było zwiększenie odległości międzypakietowej montmorillonitu i hydrotalkitu oraz hydrofobizacja tych materiałów, mająca ułatwić pęcznienie w organicznym rozpuszczalniku. Następnie obie formy organo-mineralne poddano działaniu 1-oktanolu w temperaturze $70^\circ C$, w celu uzyskania eksfoliacji/delaminacji. Proces wspomagany był traktowaniem ultradźwiękami. W rezultacie dla montmorillonitu otrzymano roztwór opalizujący, a dla hydrotalkitu klarowny. Możliwość odbudowy struktury zbadano wytrącając osady minerałów z roztworów w oktanolu przez dodanie polarnego rozpuszczalnika (aceton). W celu uzyskania kompozytu koloidalne roztwory zdelaminowanych minerałów połączono, ultradźwiękowano, a następnie poddano obróbce przez 16 godz. w $180^\circ C$ w mineralizatorze mikrofalowym. Z otrzymanego prawie przezroczysty roztworu wytrącono osad przez dodanie acetonu.

Charakterystyka fizykochemiczna z wykorzystaniem metod XRD, XRF, FTIR, SEM, TG/DTG/DSC potwierdziła zajście wymiany jonowej na etapie otrzymywania form organomineralnych i wykazała, m.in, że kationy DTMA przyjęły w przestrzeniach międzypakietowych montmorillonitu orientację równoległą do płaszczyzny 001 minerału, natomiast aniony DDS ułożone są w obszarze międzywarstwowym hydrotalkitu prostopadle do powierzchni warstw. Stwierdzono, że montmorillonit odzyskany z formy zdelaminowanej w oktanolu miał strukturę praktycznie nie różniącą się od materiału sprzed delaminacji, natomiast odległość międzywarstwowa w odzyskanym hydrotalkicie uległa zmniejszeniu o 10%. Charakterystyka fizykochemiczna kompozytu powstałego ze zdelaminowanych form organomineralnych, a w szczególności analiza XRD ukazująca refleksy montmorillonitu przy braku refleksów hydrotalkitu, wykazała, że osnowę otrzymanego kompozytu stanowią odbudowane krystaliny organo-montmorillonitu, pomiędzy którymi znajdują się rozproszone warstwy zdelaminowanego hydrotalkitu.

Uzyskane wyniki posłużą do optymalizacji metodyki delaminacji minerałów warstwowych i opracowania procedury otrzymywania interstratyfikowanych kompozytów mineralnych.

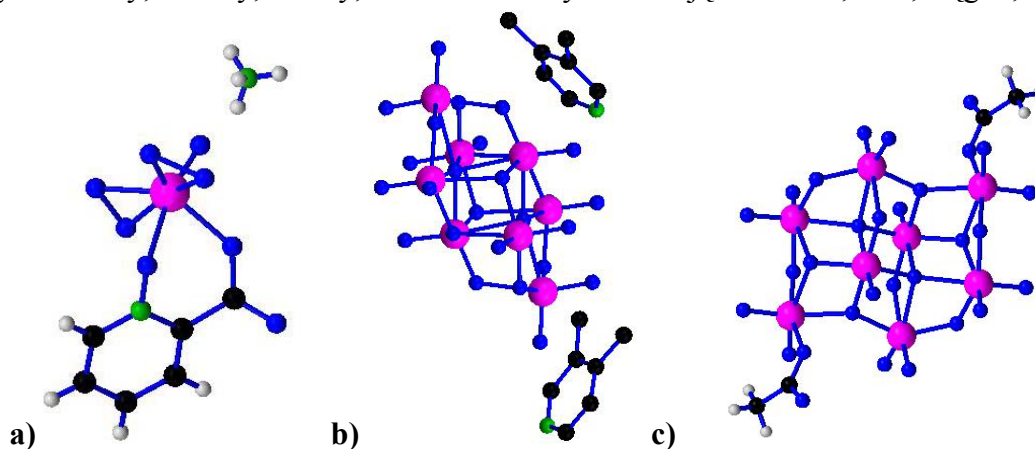
2. Nowe perokso - związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania

(prof. Wiesław Łasocha, dr Dariusz Mucha, mgr Anna Szymańska, dr Katarzyna Luberda-Durnaś, mgr Marta Grzesiak-Nowak)

Prowadzone badania dotyczyły syntez oraz badań strukturalnych nowych nadtlennych związków Mo, W oraz nowych polimolibdenianów amin. Dla części uzyskanych połączeń przeprowadzono testy katalitycznego utleniania cykloalkanów. W szczególności:

1. Przeprowadzono szereg syntez związków typu perokso z kwasem nikotynowym, izonikotynowym, oraz pikolinowym. Ponieważ zauważono, iż w tworzone związki wbudowuje się grupa N-tlenku pirydyny, w części syntez zastosowano nadtlenek kwasu nikotynowego (nic-O), pikolinowego (pic-O) oraz Na_2MoO_4 i K_2MoO_4 jako źródła molibdenu. Uzyskano monokryształy $\text{NH}_4(\text{pic-O})\text{MoO}(\text{O}_2)_2$, oraz polikrystaliczną, izomorficzną sól potasową. Dla soli amonowej wyznaczono strukturę krystaliczną (Rys.1a). Sól potasowa jest w trakcie badań.
2. Prowadzono badania nad uzyskaniem mieszanych peroksomolibdenianów molibdenowo-wolframowych. Analizy chemiczne i badania SEM EDX wskazują, iż w zastosowanych warunkach obserwujemy separacje związków zawierających molibden i wolfram.
3. Dla celów badań katalitycznych dopracowywano metodę syntezy oktamolibdenianów 3,4-dimetylopirydyny (3,4-DMP). W ramach badań obok γ -oktamolibdenianu 3,4-dimetylopirydyny uzyskano nieopisaną w literaturze sól $(3,4\text{-DMP})_4(\beta\text{-Mo}_8\text{O}_{26})$, zbadaną strukturalnie metodą dyfrakcji monokryształów w trakcie prowadzonych badań (rys. b).
4. Pod kątem przyszłych badań katalitycznych prowadzono prace preparatywne nad uzyskaniem nowych warstwowych molibdenianów o dużej odległości międzywarstwowej. Badania skoncentrowano na molibdenianach 4-propyloaniliny i 4-butyloaniliny. W ramach badań uzyskano trzy nowe polimolibdeniany 4-propyloaniliny, w tym: β -oktamolibdenian, di(acetato)oktamolibdenian, warstwowy pentamolibdenian oraz $(\beta\text{-Mo}_8\text{O}_{26})$ butyloaniliny.
5. Dla części związków przeprowadzono testy katalitycznego utleniania cyklooktanu, cykloheksanu i cyklopentanu przy użyciu tlenu z powietrza, wykonywane we współpracy z grupą dr. J.Połtowicza i dr K.Pamin (IKiFP PAN).

Poniższy rysunek przedstawia udokładnioną jednostkę asymetryczną: a) $\text{NH}_4(\text{pic-O})\text{MoO}(\text{O}_2)_2$, b) $(3,4\text{-DMP})_4(\beta\text{-Mo}_8\text{O}_{26})$, c) anion di(acetato)oktamolibdenianowy. Kolory fioletowy, zielony, czarny, niebieski i szary oznaczają molibden, azot, węgiel, tlen i wodór.



Podsumowując. Otrzymano oraz wyznaczono struktury krystaliczne 5 nowych molibdenianów amin aromatycznych, oraz jednego peroksomolibdenianu. Dla większości związków wykonano testy katalitycznego utleniania. Wysoką aktywność wykazał warstwowy pentamolibdenian 4-propyloaniliny oraz β -oktamolibdenian 3,4-dimetylopirydyny.

3. Procesy fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza - efekty synergiczne

(prof. Piotr Warszński, dr hab. Paweł Nowak prof. IkiFP PAN)

Barwne zanieczyszczenia pochodzące z przemysłu włókienniczego są istotnym źródłem skażenia środowiska wodnego. Szacuje się, że 15% światowej produkcji barwników trafia do środowiska wraz ze ściekami poprodukcyjnymi. Jedną z wszechobecnych i niebezpiecznych grup zanieczyszczeń są barwniki azowe, m.in. rodamina B. Powszechnie wiadomo, że barwniki azowe oraz produkty ich rozkładu, zwłaszcza aminy aromatyczne są silnie mutagenne i rakotwórcze. Kolorowe ścieki mogą powodować poważne zaburzenia czynności biologicznej człowieka, jak chociażby nudności, krwotok, owrzodzenia skóry i błony śluzowej, zapalenia skóry, uszkodzenie przegrody nosowej, poważne podrażnienia dróg oddechowych czy nawet raka. Innymi substancjami nasręczającymi problemów są błękit metylenowy oraz azur B. Konieczne jest zatem zminimalizowanie ilości barwników w wodzie, która może być użyta do picia i celów gospodarczych. Co więcej, z uwagi na zwiększające się restrykcyjne wymagania dotyczące jakości wody pitnej niezbędne jest opracowanie innowacyjnych metod oczyszczania wody.

Nasze prace skoncentrowane były na badaniu rozkładu modelowych związków organicznych w systemie, który wykorzystuje skorelowane działanie katalizatora aktywowanego światłem UV oraz silnego środka utleniającego. Detekcję rozkładu materii organicznej prowadzono przy zastosowaniu spektrofotometrii w zakresie UV-VIS, przy odpowiedniej dla każdej substancji analitycznej długości fali i porównywano z parametrem CHZT-Mn, oznaczanym standardową metodą PN-85/C-04578.02, oraz OWO (Ogólny Węgiel Organiczny). Ponadto wykonano analizę spektrofluorymetryczną.

Wynikiem równoczesnego zastosowania fotokatalizatora (TiO_2) i utleniacza – nadsiarczanu sodu jest wysoka konwersja związków organicznych, znacznie przewyższającą efektywność osiąganą w wyniku działania samego katalizatora czy środka utleniającego. Zaobserwowano zachodzenie synergii w przypadku skompilowanego użycia TiO_2 i $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$, co potwierdzają pomiary spektrofotometryczne i analiza miareczkowa (CHZT-Mn). Z drugiej strony analiza wyników TOC wykazała, że barwne, aromatyczne komponenty są głównie rozkładane w synergistycznym procesie z wykorzystaniem TiO_2 i $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$. Ponadto przeprowadzono porównanie dwóch metod dozowania utleniacza: ciągłe dozowanie oraz poprzez aplikację nieorganicznych nośników ze środkiem utleniającym. Zsyntezowano różne kapsułki z utleniaczem (woskowe, PDMS) i sprawdzono ich przepuszczalność (pomiary wypływu czynnika utleniającego), stabilność a także aktywność. Uzyskane wyniki pozwoliły stwierdzić, że obie metody aplikacji utleniacza pozwalają na uzyskanie efektu synergicznego w rozkładzie barwników azowych.

4. Synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne bi-kationowych soli heteropolikwasów

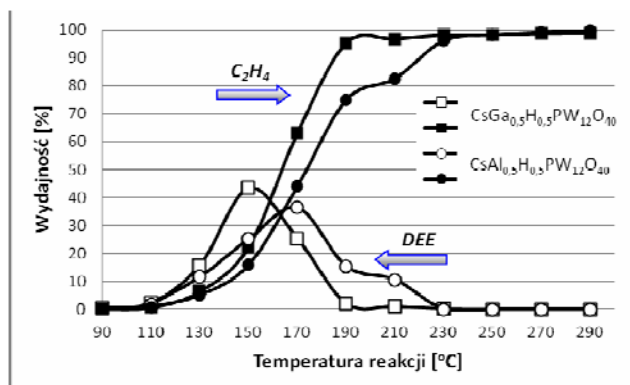
(prof. Adam Bielański, dr.hab. Anna Micek-Ilnicka, dr Urszula Filek, prof. Małgorzata Witko, dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof IKiFP PAN)

Celem badań było opracowanie syntezy i opis właściwości fizykochemicznych soli bi-kationowych heteropolikwasów typu Keggina o składzie $\text{CsMe}_{0,5}\text{H}_{0,5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ i $\text{CsMe}_{0,5}\text{H}_{0,5}\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$, (gdzie $\text{Me}=\text{Al}, \text{Ga}$). Aktywność katalityczną badanych układów zmierzono w modelowej reakcji odwadniania etanolu. Wyniki katalityczne soli bi-kationowych zostały porównane z aktywnością soli monokationowych tych samych heteropolikwasów. Równolegle przeprowadzone zostały obliczenia struktury elektronowej otrzymanych soli heteropolikwasów.

Sole bi-kationowe otrzymano z wodnego roztworu heteropolikwasów $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ (HPW) i $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ (HPMo), do których przy ciągłym mieszaniu, dodano określone ilości roztworu azotanu galu bądź glinu (w 50°C przez 2h), a następnie roztworu węgłanu cezu. Po odparowaniu preparaty suszono w temp. 60°C przez 2h. Otrzymane sole zostały poddane kompleksowej analizie rentgenowskiej, termicznej i analizie w podczerwieni, w celu określenia ich krystaliczności, stabilności termicznej i identyfikacji drgań strukturalnych. Morfologię powierzchni i % at. poszczególnych pierwiastków w solach zbadano przy użyciu mikroskopu skaningowego. Testy katalityczne, odwadniania etanolu, prowadzono w fazie gazowej, w reaktorze przepływowym na stałych solach bi-kationowych, w zakresie temp. $90\text{--}290^\circ\text{C}$. Modelowanie teoretyczne rozpoczęto od wyznaczenia struktury elektronowej soli monokationowych (Ga, Al, Cs). Dodatkowo dla każdego z badanych kationów kompensujących przebadano proponowany w literaturze mechanizm tworzenia centrów kwasowych. Wykonano również wstępne obliczenia dla soli bi-kationowych.

Zsyntetyzowano sole (CsGaHPW , CsAlHPW , CsGaHPMo i CsAlHPMo) z zachowaniem nienaruszonej struktury anionu typu Keggina, co potwierdzono analizą w podczerwieni. Zdjęcia mikroskopowe oraz analiza EDX potwierdziły jednorodność składu. Analiza termiczna wykazała dla każdej z próbek ubytek wody w ilości ok. 11 $\text{H}_2\text{O}/\text{KU}$. Produktami reakcji odwadniania etanolu były etylen, eter dietylowy (DEE) i acetaldehyd. Dla wszystkich preparatów konwersja etanolu rośnie wraz z temperaturą reakcji. Sole bi-kationowe kwasu HPW uzyskały wyższe konwersje (w 190°C) alkoholu (powyżej 90%) w porównaniu z solami kwasu HPMo (poniżej 50%). W zakresie temperatur $250\text{--}290^\circ\text{C}$, głównym produktem reakcji odwodnienia dla soli CsGaHPMo i CsAlHPMo , o porównywalnej aktywności, był acetaldehyd. Z kolei sól CsGaHPW wykazuje wyższą aktywność w porównaniu z solą CsAlHPW , a w 190°C niemal 100% wydajność do etylenu (Rysunek). Interesujący efekt katalityczny zaobserwowano dla soli bi- i mono-kationowych heteropolikwasu HPMo, dla których konwersja etanolu była wyższa niż na heteropolikwasie i malała zgodnie z szeregiem: $\text{CsGaHPMo}, \text{CsAlHPMo} \gg \text{GaPMo}, \text{AlPMo} > \text{HPMo}$. Obliczenia struktury elektronowej soli monokationowych Al, Ga, In, Cs jak i mechanizmu tworzenia centrów kwasowych z udziałem tych kationów pokazały, że właściwości kwasowe tych soli korelują z szerokością przerwy energetycznej pomiędzy pasmem walencyjnym a pasmem przewodnictwa i zmieniają się w szeregu $\text{Ga} > \text{In} > \text{Al}$.

Uzyskane wyniki katalityczne pozwoliły określić wpływ rodzaju układu bi-kationowego Cs-Ga lub Cs-Al, na aktywność katalityczną soli heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych. Kontynuacji wymagają obliczenia teoretyczne struktury elektronowej soli bi-kationowych.



5. Materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe i modelowanie kwantowo-chemiczne

(rof. Ewa Broclawik, dr hab. Mirosław Derewiński prof. IkiFP PAN, prof. Bogdan Sulikowski)

Celem badań kwantowo-chemicznych było w 2013 roku określenie charakteru przepływu ładunku oraz spinu pomiędzy centrum Cu(II) w zeolicie a adsorbowaną cząsteczką NO oraz wyjaśnienie wpływu procesów elektronowych na mechanizm aktywacji/dezaktywacji NO. Porównanie kanałów przepływu elektronów dla centrum kationowego Cu(II) z badanymi w poprzednich latach centrami Cu(I), wniosło nowe informacje na temat roli, jaką odgrywa zeolit w promowaniu aktywności centrów kationowych o zmiennym stopniu utlenienia.

Analiza opierała się na teoretycznej metodzie NOCV (Natural Orbital for Chemical Valence), rozkładającej całkowitą zmianę gęstości elektronowej skutkiem adsorpcji liganda na centrum aktywnym, na niezależne kanały przepływu elektronów pomiędzy fragmentami, zdefiniowanymi jako centrum kationowe Cu(I/II) oraz wolny ligand NO. Jako model adsorpcji NO przyjęto ligand związany z kationem Cu^{2+} koordynowanym przez anion $[\text{Al}(\text{OH})_4]^-$ (T1). Nasze wyniki potwierdziły, że podczas gdy w całkowitym transferze elektronów pomiędzy NO a centrum kationowym Cu(I) dominowała π^* -donacja zwrotna (wspomagająca aktywację cząsteczki NO), w przypadku centrum Cu(II) przeważa donacja niesparowanego elektronu (osłabiająca aktywację), efektywna tylko dla polaryzacji spinowej α .

Nowym, bardzo interesującym wynikiem badań jest wskazanie roli polaryzacji spinowej, która ujawnia się dopiero po zastosowaniu rozdzielczości spinowej. Pokazano, że poszczególne przepływy elektronowe mogą być efektywne tylko dla wybranych polaryzacji spinowych, co może mieć duże znaczenie dla badań w aktywnie rozwijającej się dziedzinie *katalizy spinowej*.

Otrzymanie innowacyjnych katalizatorów zeolitowych wymaga zrozumienia relacji zachodzących pomiędzy ich strukturą, składem i morfologią a wykazywanymi właściwościami katalitycznymi. Celem badań w roku 2013 było określenie zależności pomiędzy modyfikowanymi zeolitami typu fojazytu a ich aktywnością i selektywnością w procesie transformacji α -pinenu w fazie ciekłej. Klasa terpenów obejmuje węglowodory o urozmaiconej budowie. Wśród nich α -pinen jest ważnym przedstawicielem monoterenów, wykorzystywanym do syntezy półproduktów przemysłu chemicznego: kamfenu, limonenu i *p*-cymenu. Natomiast limonen jest jednym z produktów transformacji α -pinenu. Transformacja α -pinenu na drodze izomeryzacji jest procesem przemysłowym, jednakże stosowany katalizator posiada szereg wad. Dlatego podjęto badania mające na celu zastąpienie go w dalszej perspektywie kontaktami glinokrzemianowymi o wyższej aktywności i selektywności.

Badania ogniskowały się wokół wprowadzenia zaplanowanych zmian w statusie glinu, znajdującego się w komórce elementarnej zeolitu typu Y w pozycjach tetraedrycznych. W tym celu przygotowano serię preparatów zeolitowych stosując kombinowane metody modyfikacji: wymiany jonowej, wygrzewania odpowiednich form zeolitu w wysokich temperaturach w różnych warunkach, oraz ekstrakcji preparatów roztworami kwasu mineralnego o dobranym stężeniu. Próbki scharakteryzowano następującymi metodami: XRD, BET, spektroskopią w podczerwieni i spektroskopią magnetycznego rezonansu jądrowego w ciele stałym dla jąder ^{29}Si , ^{27}Al i ^1H .

Badania prowadzą do określenia zjawisk towarzyszących modyfikacjom zeolitów, czyli ustalenia, które z nich i w jaki sposób wpływają pozytywnie na ich aktywność katalityczną i selektywność. Badania mogą być w przyszłości wykorzystane do otrzymywania heterogenicznych katalizatorów o podwyższonych parametrach pracy, nie tylko dla fazy ciekłej, ale również dla fazy gazowej.

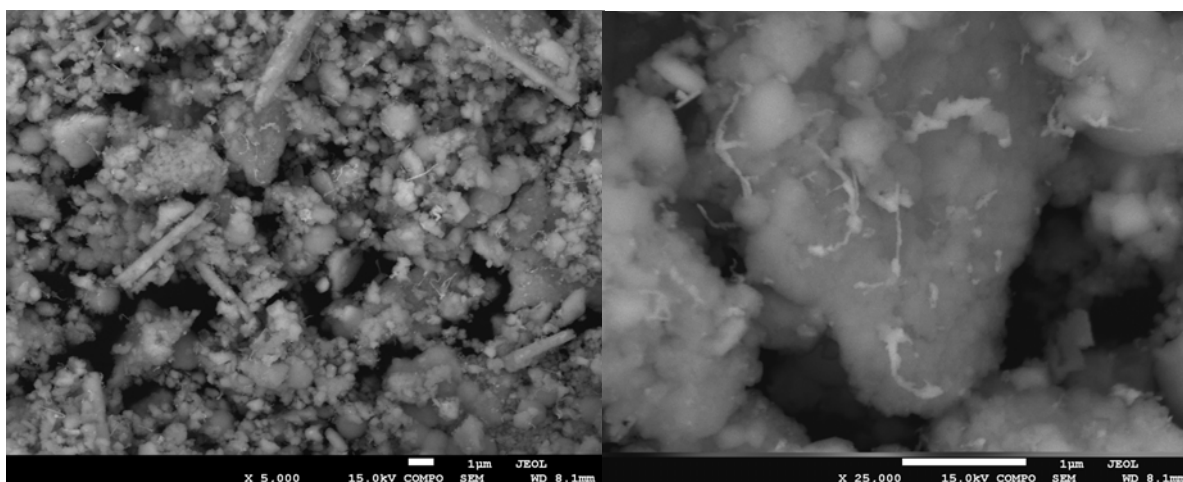
6. Nowe materiały dla wysokotemperaturowych ogniw paliwowych

(dr Michał Mosiałek, dr Aneta Michna, dr Magdalena Dudek [AGH], mgr inż. Maciej Tatko, mgr Aneta Kędra, dr Grzegorz Mordarski)

W ostatnich latach badania w zakresie stałotlenkowych ogniw paliwowych koncentrują się wokół tematyki związanej z obniżeniem temperatury pracy ogniwa do 500–700°C. Wydajność perowskitowych materiałów katodowych może być poprawiona poprzez wprowadzenie drugiej aktywnej fazy, na przykład srebra. Dotychczas tego rodzaju kompozyty były wykonywane z wykorzystaniem procedury dwustopniowego spiekania. W etapie pierwszym spiekano katodę perowskitową, wprowadzano roztwór azotanu srebra zawierający reduktor, a następnie proces spiekania powtarzano. Celem naszych badań było uproszczenie procedury otrzymywania perowskitowych materiałów katodowych. Jako obiekt badań wybraliśmy proszkowy kompozyt srebro-perowskit.

W charakterze materiału perowskitowego zastosowano $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_3$ (BSCF), $Sm_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9}$ (SDC) został użyty jako elektrolit, natomiast do wykonania anody zastosowano kompozyt $NiO-Gd_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9}$ (GDC). BSCF został otrzymany z azotanów metodą Pechinniego. Otrzymany produkt był spiekany w 1100°C przez 3 godz. i mielony w młynie wibracyjno-rotacyjnym w alkoholu absolutnym z użyciem mielników cyrkonowych. Zol Ag otrzymano metodą jednostopniowej redukcji azotanu srebra etanolem w obecności poliwinylpirolidonu (PVP) pełniącego funkcję stabilizatora. Następnie do otrzymanego zolu dodano BSCF w postaci proszku, a całość mieszano przez 40 min na mieszadle. W trakcie mieszania nanocząstki srebra były adsorbowane na powierzchni materiału perowskitowego (BSCF). Otrzymano nanocząstki srebra o średnicy 40 nm równomiernie rozłożone na szkielecie BSCF (Rys. 1). Następnie przygotowano katody w jednostopniowym procesie spiekania.

Dla porównania właściwości katalitycznych w reakcji redukcji tlenu, wykonano i przetestowano katody BSCF i Ag–BSCF otrzymane zarówno tradycyjnie jak i opisaną powyżej metodą. Katody były testowane zarówno metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej w mieszaninach argon – tlen w układzie trójelektrodowym jak i w ogniwach $H_2|Ni-GDC|SDC|BSCF-GDC|Ag-BSCF|O_2$. Ogniwo z katodą z materiału kompozytowego Ag–BSCF otrzymanego nową mokrą metodą wykazało wyższą wydajność o 48% w porównaniu do ogniwa z katodą z BSCF. Pomiary ESI wykazały, że srebro poprawia wydajność katody z BSCF w zakresie niskich stężeń tlenu.



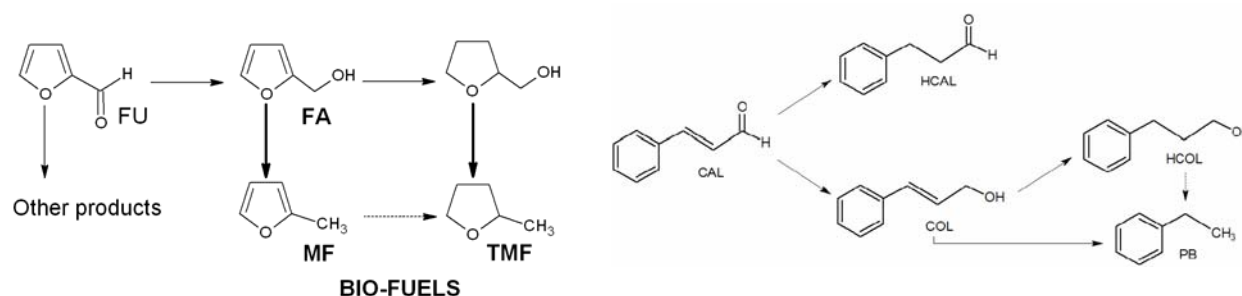
Rysunek 1. Mikrostruktura otrzymanych kompozytów proszkowych Ag–BSCF

7. Procesy katalityczne z udziałem bio-surowców

(prof. Alicja Drelinkiewicz, mgr inż. Żaneta Kalembe-Jaje, dr Erwin Lalik, dr Robert Kosydar, mgr Tomasz Szumelda)

Przeprowadzone badania dotyczyły dwu procesów z udziałem bio-reagentów, a w szczególności bio-paliw. Pierwszy, to **transesterifikacja triglicerydów** metanolem prowadząca do utworzenia bio-estrów (Biodiesel). Jako stałe katalizatory kwasowe zastosowano polianilinę sprotonowaną kwasami alkilo-sulfonowymi: metanosulfonowy, kamposulfonowy, lignosulfonowy (komercyjny katalizator). Testowano je w reakcji metanolizy triacetinu (modelowy trigliceryd) i oleju rycynowego oraz w reakcji estryfikacji kwasu tłuszczowego (rycynolowy). Katalizatory zawierające kwasy alkilo-sulfonowe były znacząco aktywniejsze niż preparaty protonowane H_2SO_4 , co przypisano zwiększonej hydrofobowości w otoczeniu centrów aktywnych. Skutkowało to także stabilną i wysoką aktywnością w trakcie reakcji. Najwyższą aktywność wykazywał katalizator zawierający kwas metanosulfonowy, ze względu na odpowiednie właściwości grupy alkilowej.

Obecnie notuje się bardzo duży wzrost zainteresowania pochodnymi furanu nazwanymi "uśpione olbrzymy", a w szczególności procesami katalitycznymi dotyczącymi: (i) ich otrzymywania z bio-surowców (celuloza, sacharydy), jak i (ii) ich konwersji do chemikaliów i bio-paliw. Obejmują one 2-metyltetrahydrofuran (TMF), 2-metylfuran (MF) i etery (metyl, butyl) tetrahydrofuranów.



Są to produkty reakcji następczych zachodzących w trakcie **katalitycznego uwodorniania furfuralu** (FU) (Schemat). Schemat reakcji uwodorniania furfuralu jest podobny do tego w trakcie uwodorniania α,β -nienasyconych aldehydów, np. cynamonowego (CAL). W obydwu przypadkach, obok równoległych reakcji uwodorniania $C=O$ i/lub $C=C$ także zachodzą reakcje hydro-odtleniania nienasyconych alkoholi (FA lub COL) prowadzące odpowiednio do produktów, MF (bio-paliwo) i propylobenzen (PB).

Obecnie badano katalityczne uwodornienie obydwu aldehydów, FU i CAL ($20-60^\circ C$, 1-6 atm H_2 , toluen i izo-propanol) w obecności nośnikowych [SiO_2 i carbon black (Vulcan XC-72)] katalizatorów bimetalicznych bazujących na palladzie: Pd-Pt, Pd-Au, Pd-Ir, Pd-Ru o zmiennym składzie metali. Pallad wybrano ze względu na wysoką reaktywność w uwodornianiu $C=C$, pozostałe metale (Pt, Ru, Ir, Au) różnią się reaktywnością w redukcji $C=O$. Katalizatory syntezowano metodą odwróconej mikroemulsji „water-in-oil”, co skutkowało uzyskaniem preparatów o dobrze zdefiniowanej fazie metalicznej; nanocząstki metalu 5-8 nm, o wielkości w wąskim zakresie (uniform dispersion). Zastosowane techniki XRD, XPS, SEM (EDS) potwierdziły obecność bimetalicznych nanocząstek, których strukturę dla katalizatorów Pd-Au zidentyfikowano jako "cluster-in-cluster". Wyniki badań potwierdziły wyższą aktywność katalizatorów Pd-Pt/C w reakcjach uwodorniania $C=C/C=O$ niż monometalicznego Pd. Pośród wszystkich katalizatorów, Pd-Ir/C i Pd-Au/C wykazywały najwyższą aktywność w reakcji hydroodtlenienia. Najlepszą selektywność tej reakcji (40%) uzyskano w obecności katalizatora 2%(Pd-Ir)/C. Reaktywności te są interesującym i nowym efektem i stanowią dobrą podstawę do kontynuacji badań.

8. Właściwości strukturalne, elektronowe i dynamika powierzchni i nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni

(prof. Józef Korecki, dr hab. Nika Spiridis, dr Jacek Gurgul, dr Robert Socha, dr Dorota Wilgocka-Słęczak, dr Ewa Madej, dr Kinga Freindl, dr Ewa Młyńczak, mgr Barbara Wolanin (Figarska), mgr Tomasz Giela, współpraca z WFiIS AGH).

Przedmiotem badań były powierzchnie warstw i nanostruktur otrzymywanych z fazy gazowej poprzez epitaksję z wiązek molekularnych. Badania prowadzone były pod kątem określenia funkcjonalności tych struktur w zastosowaniach magnetycznych i katalitycznych, a jako podstawowe metody badawcze wykorzystywane były mikroskopie elektronów niskoenergetycznych i fotoelektronów - LEEM i PEEM, skaningowa mikroskopia tunelowa - STM, spektroskopia mössbauerowska elektronów konwersji – CEMS oraz spektroskopia fotoelektronów - XPS. Specyfiką tych badań było środowisko ultra wysokiej próżni. Pomiar magnetyczne z wykorzystaniem magnetoptycznego efektu Kerr'a prowadzone były ex-situ.

Najważniejsze realizowane prace dotyczyły:

- właściwości warstw granicznych w magnetycznych nanostrukturach metal-tlenek,
- właściwości magnetycznych epitaksjalnych warstw żelaza na wolframie badanych technikami spektroskopowymi i mikroskopowymi,
- badania procesu adsorpcji tlenu w układzie Fe/W(110),
- powierzchniowej analizy składu fazowego i struktury elektronowej katalizatorów celem określenia mechanizmu ich działania.

We współpracy ze Swiss Light Source w Paul Scherrer Institute rozwijano metodykę badań synchrotronowych z wykorzystaniem fotoemisyjnej mikroskopii elektronowej (X-PEEM).

Opracowano metodę wytwarzania polarnych warstw tlenkowych poprzez utlenianie pojedynczych warstw atomowych metalu, którą zastosowano do wzrostu FeO(111) na MgO(111) oraz dla warstw CoO(111) i CoO(001) na MgO(111) i MgO(001). W dwuwarstwach CoO/Fe zbadano wpływ orientacji krystalicznej na sprzężenie wymienne typu 'exchange bias' (EB). Pokazano, że pomimo zbliżonej jakości struktury krystalicznej oraz stechiometrii podwarstw CoO, jak również struktury chemicznej warstwy granicznej pomiędzy Fe i CoO, wielkość efektu EB była dziesięciokrotnie większa dla Fe/CoO(111), niż dla Fe/CoO(001). Tak duża wartość EB dla Fe/CoO(111) została wytłumaczona w oparciu o współdziałanie dwóch efektów: magnetycznego nieskompensowania warstwy CoO(111) oraz niewielkiej anizotropii magnetokrystalicznej warstwy Fe. Pomiar mössbauerowski w układach Fe/MgO oraz Fe/NiO pozwoliły na określenie stechiometrii i identyfikację granicznej warstwy tlenku żelaza.

Zastosowanie komplementarnych metod synchrotronowych, rezonansowego jądrowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego oraz mikroskopii fotoelektronów wzbudzanych spolaryzowanym kołowo miękkim promieniowaniem X na krawędzi L żelaza pozwoliło na określenia mechanizmu i kinetyki reorientacji spinowej w epitaksjalnych warstwach żelaza na W(110). Mikroskopia X-PEEM wykorzystana była też do badania struktury chemicznej i morfologii metalicznych nanostruktur na bazie metali 3d oraz ziem rzadkich.

Na podstawie obliczeń z wykorzystaniem metody LDA i w oparciu o pomiary CEMS zinterpretowano struktury adsorpcyjne tlenu zaobserwowane na monowarstwie żelaza na W(110) i pokazano, że przejście od prostych struktur adsorpcyjnych do fazy tlenkowej o stechiometrii FeO zachodzi poprzez formowanie się złożonych faz pośrednich.

Spektroskopia XPS stosowana była do badania stanów elektronowych pierwiastków biorących udział w reakcjach katalitycznych dla szerokiej klasy materiałów, takich jak materiały proszkowe o rozwiniętej powierzchni, cienkie warstwy, nanocząstki, a także w badaniach modelowych układów katalitycznych.

9. Badania nad mechanizmami reakcji katalitycznych niehemowych enzymów utleniających węglowodory

(dr hab. Tomasz Borowski prof. IKiFP PAN, dr Anna Wójcik, mgr Anna Miłaczewska)

W związku z rosnącym zapotrzebowaniem na wysoce selektywne i nietoksyczne katalizatory, intensywnie bada się enzymy zarówno pod kątem ich bezpośrednich zastosowań, jak i syntezy niskocząsteczkowych katalizatorów mających działać według tego samego paradygmatu, co dana grupa enzymów. Dogłębne poznanie mechanizmów reakcji katalitycznych zachodzących w centrach aktywnych enzymów i/lub układów biomimetycznych jest jednym z fundamentów dla racjonalnego projektowania takich katalizatorów.

Metodami chemii kwantowej (DFT) lub metodami hybrydowymi (QM(DFT)/MM) przebadano dwa układy: syntetyczny kompleks Cu(II) katalizujący utleniające rozcięcie wiązania C-C oraz acetylotransferazę katalizującą acetylację antybiotyku – chloramfenikolu.

Z spośród wielu przebadanych ścieżek reakcji dla reakcji O₂ z enolanowym kompleksem Cu(II) wybrano najbardziej prawdopodobny mechanizm powstawania produktu pośredniego z mostkiem nadtlenkowym między Cu(II) a substratem organicznym. Mechanizm ten bardzo przypomina przebieg analogicznej reakcji w centrum aktywnym enzymu wiążącego Cu(II) – dioksygenazy kwercytynowej i obejmuje: jednokleszczowe wiązanie substratu organicznego do jonu Cu(II), jednoelektronowe utlenienie enolanu do rodnika oraz następnie utworzenie wiązania między rodnikiem organicznym a jonem ponadtlenkowym związanym z Cu(II).

Acetylotransferaza PA4794 z *Pseudomonas aeruginosa* katalizuje nie tylko N-acetylację peptydów, ale również O-acetylację chloramfenikolu, przy czym, chloramfenikol wiąże się w miejscu wiążącym AcCoA, a nie w kanonicznym miejscu wiązania substratów. Przeprowadzone badania metodami QM/MM oraz symulacje klasycznej dynamiki molekularnej pokazały, że Tyr128 najprawdopodobniej pośredniczy w transferze grupy acetylowej z AcCoA na chloramfenikol, a Cys29 pełni rolę wyłącznie strukturalną.

Uzyskany wgląd w przebieg reakcji katalitycznych może być punktem wyjścia dla projektowania nowych katalizatorów rozcinających wiązania C-C z wykorzystaniem tlenu cząsteczkowego oraz dalszych badań nad acetylacją chloramfenikolu.

10. Dynamika molekularna w badaniach układów biologicznie czynnych

(dr hab. Tomasz Pańczyk prof. IKiFP PAN, dr Wojciech Płaziński, dr Agnieszka Brzyska)

Dynamika molekularna pozwala na badanie właściwości stosunkowo dużych układów w skali molekularnej. Ma to szczególnie istotne znaczenie w odniesieniu do układów biologicznie czynnych, które z natury zawierają setki bądź tysiące atomów, przy czym ich oddziaływanie z rozpuszczalnikiem (tj. wodą) nie może być zignorowane. Kluczowym elementem w przypadku stosowania metod dynamiki molekularnej jest opracowanie i implementacja pól siłowych, które w miarodajny sposób opisują możliwie jak najwięcej faktów znanych z doświadczenia lub/i z obliczeń kwantowochemicznych. W ostatnich latach duże zainteresowanie wzbudza oddziaływanie nanorurek węglowych z cząsteczkami biologicznie aktywnymi. Potwierdzone zostało silne wzmocnienie aktywności farmakologicznej niektórych leków antynowotworowych wskutek ich oddziaływania z nanorurkami węglowymi. Rozważa się też wykorzystanie nanorurek jako nanotransporterów cząsteczek antynowotworowych. Dlatego, celem badań było opracowanie takiego modelu do badań struktury kompleksów nanorurek węglowych z cząsteczkami leków oraz dynamiki ich absorpcji/adsorpcji/desorpcji na powierzchni i we wnętrzu tych makrocząsteczek. Dodatkowo, celem prac była również implementacja biomolekularnego pola siłowego GROMOS 56aCARBO w pakiecie GROMACS.

Typowym przedstawicielem cząsteczki o potwierdzonej skuteczności jako leku antynowotworowego jest cisplatyna. Bardzo dobrze znane są również silne skutki uboczne generowane w organizmie przez tą cząsteczkę. Kompleks nanorurka węglowa - cisplatyna może, zatem służyć jako modelowy układ badawczy, którego szczegółowe właściwości mogą posłużyć do wyciągnięcia wniosków o ogólnym charakterze w odniesieniu do znaczenia nanorurek węglowych jako układów biologicznie aktywnych. W wyniku przeprowadzonych prac opracowano model obliczeniowy dla układu wielościennej nanorurki węglowej – cisplatyna. Analiza tego modelu przy użyciu dynamiki molekularnej oraz metod analitycznych pozwoliła na zbadanie struktury cisplatyny we wnętrzu nanorurki węglowej, zmian jej właściwości fizykochemicznych w stosunku do roztworu objętościowego jak też mechanizmu i dynamiki desorpcji cisplatyny z wnętrza nanorurki węglowej. W celu implementacji pola siłowego GROMOS 56aCARBO zmodyfikowano domyślny sposób generowania oddziaływań 'niewiązanych' typu 1-4 oraz stworzono program automatycznie generujący parametry oddziaływań Lennard-Jonesa dla wybranych par atomów (zgodnie z zasadami pola siłowego). Program został udostępniony na stronie internetowej pakietu GROMACS.

Do najważniejszych osiągnięć na tym etapie badań należy zaliczyć: wyznaczenie współczynnika dyfuzji cisplatyny i jego zmian w funkcji parametrów nanorurki węglowej oraz wyprowadzenie równania analitycznego, które w sposób ilościowy przewiduje szybkość desorpcji cisplatyny z wnętrza nanorurek węglowych. Równanie to zostało zweryfikowane przez porównanie z wynikami obliczeń MD i pozwala na przewidywanie szybkości uwalniania leków z wnętrza nanorurek węglowych. Dodatkowo, pozwala ono na postawienie tezy, że szybkość procesu uwalniania leku przebiega według mechanizmu dyfuzji jednowymiarowej. Pole 56aCARBO zostało przetestowane na przykładzie zmian energii swobodnej towarzyszących przejściom konformacyjnym typu ${}^4C_1 \leftrightarrow {}^1C_4$ w cząsteczkach α - i β -D-glukozy.

Wyniki uzyskane na tym etapie badań mają głównie charakter poznawczy. Głównym obszarem ich wykorzystania są szersze projekty związane z projektowaniem i syntezą nośników leków. Gruntowne poznanie mikroskopowych mechanizmów działania takich układów umożliwia optymalizację ich właściwości i ewentualne uproszczenie metod ich syntezy. Pole siłowe GROMOS 56aCARBO zaimplementowane w pakiecie GROMACS może zostać wykorzystane do przeprowadzenia zaawansowanych symulacji w układach glikobiologicznych (zawierających oprócz cukrów np. proteiny), w przypadku których deformacje pierścieni węglowodanowych mogą mieć istotne znaczenie.

11. Przeróbka biomasy: odwodnienie bio-butanolu na katalizatorach tlenkowych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr hab. Ryszard Grabowski, prof. IkiFP PAN, dr Tadeusz Machej, dr Dorota Rutkowska-Żbik, dr Katarzyna Pamin, dr Jan Połtowicz, dr Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, mgr Wojciech Rojek)

Celem nowego zadania badawczego było znalezienie i optymalizacja kwaśnego katalizatora tlenkowego do reakcji odwodnienia bio-butanolu do butenu.

Różne typy kwaśnych katalizatorów tlenkowych: komercyjny Al_2O_3 (Puralox), montmorylonit z immobilizowanym heteropolikwasem fosforowo-wolframowym, Al_2O_3 (Puralox) z naniesionym 1% WO_3 , oraz Al_2O_3 (Puralox) domieszkowany 2% CeO_2 i 7% ZrO_2 poddano testom katalitycznym w procesie odwodnienia butanolu w reaktorze przepływowym pod ciśnieniem atmosferycznym, w zakresie temperatur 150°-400°C, mierząc selektywności do produktów odwodnienia butanolu: 1-butenu, cis- i trans-butenu oraz produktów ubocznych (butanal). Powierzchnię najbardziej obiecujących próbek scharakteryzowano metodami spektroskopii IR oraz TPD amoniaku, aby skorelować ich aktywność katalityczną z właściwościami powierzchni.

Większość badanych próbek okazała się aktywna w badanej reakcji osiągając konwersję butanolu 100% już w temperaturze 200°C. Poszukiwania katalizatora charakteryzującego się selektywnością do mieszaniny butenów znacząco różnej niż opisanej równowagą termodynamiczną w danych warunkach ciśnienia i temperatury pokazały, że najbardziej obiecującym katalizatorem jest Al_2O_3 z naniesionym 1% WO_3 . Aktywność badanego preparatu korelowano z właściwościami kwasowo-zasadowymi powierzchni, określanymi na podstawie pomiarów adsorpcji pirydyny i amoniaku. W czystym Al_2O_3 badania IR wskazują na brak centrów Brönsteda, obecne są jedynie centra Lewisa. Dodanie WO_3 nie wpływa znacząco na ich ilość. Ponadto, już niewielki dodatek WO_3 do Al_2O_3 prowadzi do znacznego ograniczenia stężenia powierzchniowych grup OH oraz zmienia skład równowagowy powstającej mieszaniny butenów.

Badany proces pozyskiwania butenu z bio-butanolu, a w dalszym etapie i butadienu, stanowić może alternatywne do złóż kopalnych (ropa naftowa) źródło tych alkenów. Postuluje się, że dzięki badanemu procesowi alkohol butylowy, będący produktem fermentacji biomasy, może dalej być wykorzystany jako substrat do syntezy chemicznej. Przeprowadzone badania określające zależność pomiędzy składem i strukturą powierzchni a aktywnością przetestowanych preparatów ułatwią w przyszłości opracowanie katalizatorów aktywnych w reakcji odwodnienia bio-butanolu.

12. Rozwinięcie metody wzmocnienia koloidalnego do wyznaczania topologii i właściwości elektrokinetycznych monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe

(prof. Zbigniew Adamczyk, dr hab. Jakub Barbasz, dr Małgorzata Nattich-Rak, mgr Marta Sadowska, dr Monika Wasilewska)

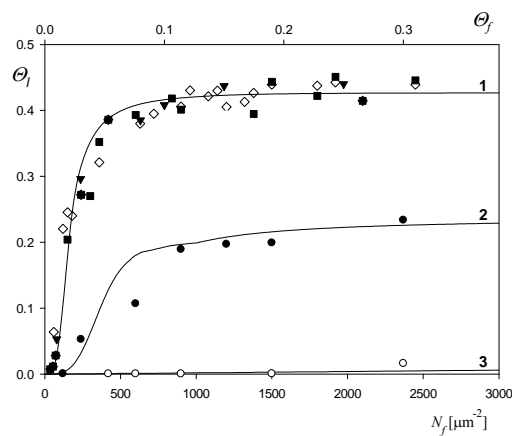
Głównym celem przeprowadzonych badań było rozwinięcie efektywnej metody detekcji monowarstw białkowych na powierzchniach ciało stałe/elektrolit, działającej w warunkach *in situ*. Metoda ta, określana mianem wzmocnienia koloidalnego (angielski termin colloid enhancement CE) opiera się na wykorzystaniu niespecyficznych (elektrostatycznych) oddziaływań cząstek koloidalnych z cząsteczkami białka tworzącymi monowarstwę.

Technika CE została wykorzystana do charakterystyki monowarstw fibrynogenu wołowego i ludzkiego na powierzchni miki tworzonych w warunkach transportu dyfuzyjnego przy pH 3.5. Stężenie powierzchniowe fibrynogenu (pokrycie) N_f wyznaczano ilościowo przy użyciu obrazowania techniką AFM pojedynczych cząsteczek. Jako układ koloidalny zastosowano suspensję ujemnie naładowanego lateksu polistyrenowego o wielkości cząstek 820 nm. Pokrycie lateksu wyznaczano przy pomocy mikroskopii optycznej oraz mikroskopii sił atomowych.

Zaobserwowano zjawisko anomального osadzania lateksu na warstewkach fibrynogenu wykazujących ujemną średnią wartość potencjału zeta, co jest w sprzeczności z klasyczną teorią DLVO opierającą się na koncepcji uśrednionego pola. Ponadto, zaobserwowano również znaczące osadzanie cząstek lateksu na monowarstwach fibrynogenu dla niskiej siły jonowej 6×10^{-4} M, (Rys. 1). Fakt ten potwierdza jednoznacznie, że cząsteczki fibrynogenu były zaadsorbowane w orientacji prostopadłej i konformacji rozwiniętej. Wyniki doświadczalne interpretowano ilościowo w oparciu o wyniki teoretyczne uzyskane na drodze modelowania numerycznego metodą Monte-Carlo, RSA (linie ciągłe na Rys. 1).

Przeprowadzone pomiary wykazały jednoznacznie, że metoda CE może być zastosowana jako efektywne narzędzie do określania mechanizmów adsorpcji białek na powierzchniach międzyfazowych ciało stałe/elektrolit, w szczególności orientacji i konformacji cząsteczek, co ma istotne znaczenie poznawcze.

Uzyskane wyniki mogą być również wykorzystane w sposób praktycznych do wytwarzania monowarstw białek o ściśle zdefiniowanym pokryciu i orientacji cząsteczek, co umożliwia efektywne przeprowadzenie testów immunologicznych o wysokiej czułości.



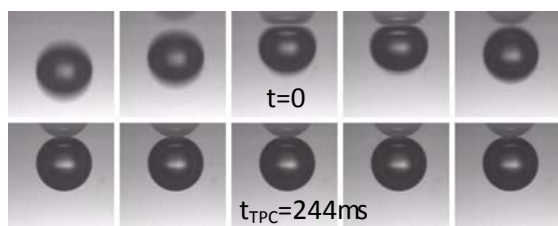
Rysunek 1. Zależność pokrycia cząstek lateksu θ_l od stężenia powierzchniowego fibrynogenu N_f [μm^{-2}] wyznaczona przy pomocy metody CE dla pH 3.5. Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane dla różnych sił jonowych: (\blacktriangledown), 0.15 M; (\diamond), 10^{-2} M; (\blacksquare), 10^{-3} M; (\bullet), 6×10^{-4} M; (\circ), 3×10^{-4} M. Linie ciągłe 1-3 przedstawiają wyniki teoretyczne wyznaczone na podstawie modelowania metodą Monte-Carlo, RSA.

13. Wpływ rozmiarów powstającego filmu ciekłego i ładunku elektrycznego na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o niskiej hydrofobowości

(prof. Kazimierz Małyca, dr Jan Zawala, dr Dominik Kosior, dr Marcel Krzan, mgr inż. Anna Niecikowska)

Celem badań jest określenie wpływu ładunku elektrycznego powierzchni międzyfazowych i rozmiarów powstającego filmu ciekłego na kinetykę utworzenia kontaktu trójfazowego w trakcie kolizji pęcherzyków z powierzchniami ciała stałego o niskiej hydrofobowości. Kolizje pęcherzyków z powierzchniami ciał stałych są to procesy b. szybkie, zachodzące w czasach milisekundowych. Kontakt trójfazowy powstaje, jeżeli w trakcie kolizji nastąpi przerwanie filmu ciekłego oddzielającego powierzchnię pęcherzyka od powierzchni ciała stałego. Oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy podwójnymi warstwami elektrycznymi powierzchni międzyfazowych oraz siły van der Waalsa determinują (teoria DLVO) stabilność cienkich filmów ciekłych, a rozmiar (promień) powstającego filmu ciekłego wpływa na szybkość jego wyciekania do krytycznej grubości pęknięcia.

Wykonano pomiary kinetyki powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) na hydrofilowych powierzchniach filmów tlenku tytanu oraz miki oraz na lekko shydrofobizowanych (kąąt zwilżania $\theta_{adv}=40$ i 60°) powierzchniach. Badania wykonano dla różnych rozmiarów (promień $R_b=0,2; 0,49$ i $0,74$ mm) pęcherzyków gazowych, ponieważ rozmiar filmu ciekłego, rozdzielającego oddziaływujące powierzchnie międzyfazowe ciecz/ciało stałe i ciecz/gaz, jest wprost proporcjonalny do promienia pęcherzyka. Ładunek elektryczny powierzchni międzyfazowych modyfikowano poprzez zmianę pH oraz adsorpcję surfaktantów jonowych. W wodzie destylowanej ($pH=5,8$) na hydrofilowych powierzchniach miki oraz TiO_2 nie obserwowano powstawania TPC, ponieważ powstające filmy zwilżające są stabilizowane odpychającymi oddziaływaniami elektrostatycznymi występującymi pomiędzy podobnie (ujemnie) naładowanymi powierzchniami międzyfazowymi. Pęcherzyki powietrza są ujemnie naładowane w szerokim zakresie pH, aż do $pH\sim 2$, natomiast punkt izoelektryczny (IEP) powierzchni TiO_2 jest przy $pH=4,7$. A zatem przy $pH=3,5$ w powstającym filmie zwilżającym występują przyciągające oddziaływania elektrostatyczne, które spowodowały destabilizację filmu i utworzenie kontaktu trójfazowego nawet na hydrofilowej powierzchni TiO_2 (patrz Rys. 1).



Rysunek 1. Zdjęcia pęcherzyka w trakcie 3-ciej kolizji (górny rząd) i w momencie powstawania TPC na hydrofilowej powierzchni TiO_2 (dolny rząd). $pH=3,5$, czas pomiędzy kolejnymi zdjęciami w każdym rzędzie $\Delta t=0,96ms$, $L=100mm$.

Na shydrofobizowanej powierzchni TiO_2 kontakt trójfazowy powstawał nawet przy $pH=5,8$, a występowanie przyciągających sił elektrostatycznych przy $pH < pH_{IEP}$ przyspieszało powstanie TPC (patrz Tabela). Wyniki przedstawione w Tabeli pokazują także jak wielki wpływ na kinetykę powstawania TPC ma rozmiar pęcherzyków, czyli promień powstających filmów zwilżających.

pH	Time of the TPC formation at TiO_2 surface, $\theta_{adv}=40^\circ$		
	$R_b=0,74$ mm	$R_b=0,49$ mm	$R_b=0,20$ mm
5.8	462 ± 31 ms	133 ± 31 ms	$9,6 \pm 2,1$ ms
4	229 ± 32 ms	95 ± 19 ms	$7,9 \pm 1,5$ ms
3.5	92 ± 5 ms	114 ± 39 ms	$6,9 \pm 0,9$ ms

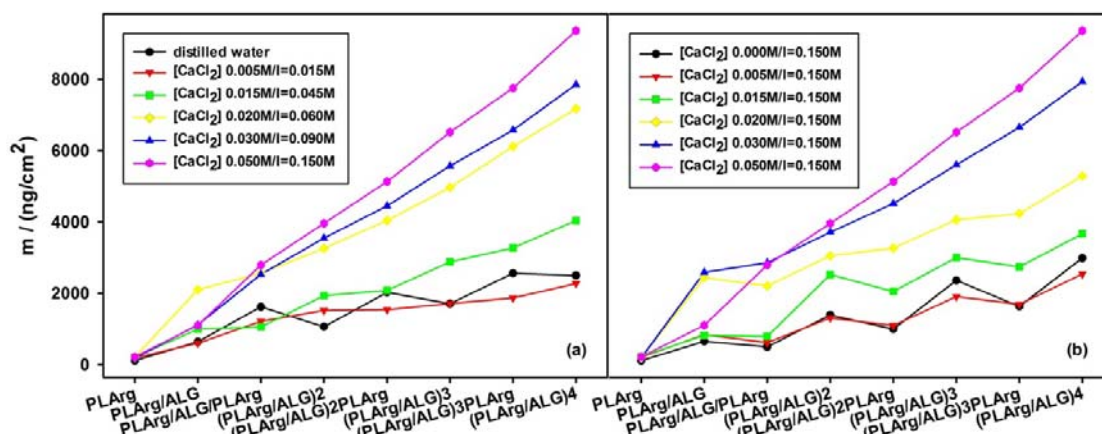
14. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

(prof. Piotr Warszyński z zespołem)

Funkcjonalne wielowarstwy polielektrolitowe tworzone na powierzchniach makroskopowych lub cząstkach/kropelkach o rozmiarach nano- i mikrometrycznych są nowym materiałem o potencjalnie szerokim spektrum zastosowań praktycznym. Wytwarzane są przez sekwencyjne nanoszenie przeciwnie naładowanych polielektrolitów, nanocząstek, surfaktantów, protein, etc. Właściwości wytwarzanych filmów oraz ich funkcje są zdefiniowane przez użyte składniki i warunki tworzenia.

Celem zadania realizowanego w roku 2013 było określenie wpływu jonów wapnia na grubość przepuszczalność wielowarstw polielektrolitowych zawierających alginian (ALG) jako polianion. Filmy o różnej liczbie warstw otrzymywano metodą sekwencyjnej adsorpcji z poli-L-argininą (PLArg) jako polikationem. W trakcie formowania wielowarstwy odmywano roztworami o różnych stężeniach soli NaCl albo/i CaCl₂. Proces powstawania wielowarstw PLArg/ALG był monitorowany in-situ za pomocą mikrowagi kwarcowej (QCM-D). Masa i grubość wielowarstw były określane metodą QCM-D i korelowane z grubościami suchych filmów zmierzonymi elipsometrycznie. Zaobserwowaliśmy silną zależność masy i grubości powstałych filmów od obecności jonów wapnia w roztworze odmywającym. Dla przykładu, zmiana roztworu odmywającego z 0.15M NaCl na 0.05M CaCl₂ spowodowała pięciokrotny wzrost masy powstałego filmu (rysunek 1.). Wzrost masy i grubości filmu można tłumaczyć sieciowaniem alginianu jonami wapnia oraz zwiększoną adsorpcją wody w usieciowanym filmie – grubość filmu na sucho, mierzona elipsometrycznie, jest dziesięć razy mniejsza niż grubość w środowisku wodnym mierzona QCM-D. Woltamperometria cykliczna z trzema czynnikami elektrochemicznymi o różnej masie cząsteczkowej została wykorzystana do określenia przepuszczalności wielowarstw osadzonych na złotej elektrodzie. Zaobserwowaliśmy spadki wartości prądów katodowych i anodowych ze wzrostem liczby osadzonych warstw, w porównaniu z czystą elektrodą. Pokazaliśmy, że wielowarstwy odmywane roztworem CaCl₂, były mniej przepuszczalne niż te odmywane roztworem NaCl jednakże, spadek przepuszczalności był zdecydowanie mniejszy niż wzrost grubości filmu spowodowany sieciowaniem.

Nasze wyniki będą miały implikacje dla przepuszczalności mikrokapsulek otrzymanych przez sieciowanie mikro-kropelki alginianowych.



Rysunek 1. Zależność masy (na jednostkę powierzchni) wielowarstw PLArg/ALG od rosnącej liczby warstw w układzie dla różnych warunków odmywania: (a) roztwory odmywające o rosnącym stężeniu CaCl₂, (b) roztwory odmywające o rosnącym stężeniu CaCl₂, ale o stałej sile jonowej (0.15M)

15. Właściwości fizyczne warstw malarskich w warunkach wysokiej wilgotności względnej

(dr Michał Łukomski, prof. Roman Kozłowski, dr hab. Łukasz Bratasz)

Celem badań było określenie zmian wymiarowych oraz właściwości mechanicznych warstw malarskich w warunkach wysokiej wilgotności względnej, kiedy spoiwa klejowe przechodzą w stan kauczukopodobny, oraz zagrożeń tych warstw uszkodzeniami fizycznymi przy przechodzeniu ze stanu kauczukopodobnego do szklistego w czasie spadku wilgotności względnej.

Drewno polichromowane należy do kategorii obiektów dziedzictwa kulturowego najbardziej zagrożonych wahaniami wilgotności względnej i temperatury. Prowadzone dotychczas badania wpływu warunków klimatycznych na rozwój zniszczeń warstw dekoracyjnych na drewnianym podłożu zaowocowały wyznaczeniem zakresu bezpiecznych fluktuacji wilgotności względnej powietrza wokół 50% - czyli w warunkach typowych dla klimatyzowanych muzeów. Tymczasem bardzo cenne zbiory polichromowanego drewna znajdują się w zamkach i kościołach, w których średnia roczna wilgotność względna przekracza 75%. W takich warunkach grunt malarski, będący częścią składową polichromowanej powierzchni, staje się ciągliwy i miękki co w sposób zdecydowany zmienia jego wrażliwość na bodźce klimatyczne.

W ramach prowadzonych prac badawczych główny nacisk położono na wyznaczenie parametrów mechanicznych zaprawy gruntowej poniżej i powyżej przejścia szklistego, które występuje w okolicach 75% wilgotności względnej. Badania prowadzono na prostopadłościennych próbkach przy pomocy maszyny wytrzymałościowej sprzężonej z komorą klimatyczną, która pozwala precyzyjnie ustalać warunki wilgotności i temperatury w otoczeniu próbki. Określono zmianę sztywności, zakresu sprężystego, współczynnika rozszerzalności wilgotnościowej oraz szybkość relaksacji i pełzania, oraz powrotu pełzaniowego, w funkcji wilgotności względnej otoczenia.

Równolegle monitorowano rozwój uszkodzeń powierzchni próbek zaprawy gruntowej na stabilnym metrycznie podłożu szklanym, poddanych różnym cyklicznym zmianom wilgotności w komorze klimatycznej, podczas których materiał przechodził przez przejście szkliste około 75% wilgotności względnej. Dla próbek gruntu o różnym składzie i grubości wyznaczono gęstość powierzchniową pęknięć w funkcji liczby zmian wilgotności, ich amplitud i szybkości. Przeprowadzone pomiary wskazują, że pierwsze pęknięcia warstwy gruntu, pojawiają się już po kilku cyklicznych zmianach wilgotności względnej otoczenia, a gęstość siatki spękań jest odwrotnie proporcjonalne do grubości pękającej warstwy.

Przeprowadzone badania pozwoliły określić wartości progowe zmian mikroklimatu, powyżej których pojawiają się trwałe deformacje i uszkodzenia fizyczne warstw malarskich o różnych grubościach.

PROJEKTY BADAWCZE MNiSW

1. Nowa metoda opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych

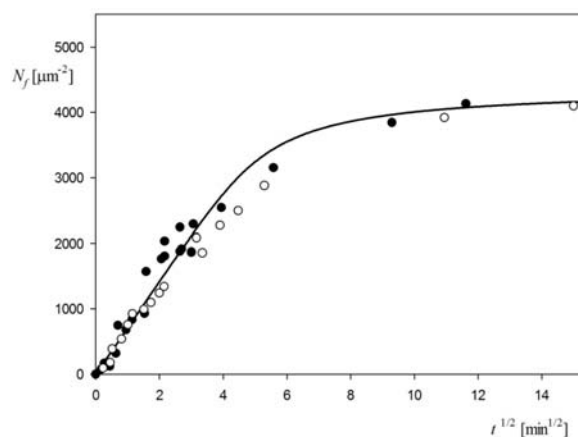
Projekt badawczy MNiSW N N204 026438 [2009-2013]

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Znajomość tensorów ruchliwości hydrodynamicznej oraz lepkości wewnętrznej ma istotne znaczenie dla wyznaczenia konformacji cząsteczek białek w roztworach oraz na powierzchniach międzyfazowych, a także dla opisu kinetyki ich adsorpcji wyznaczanej często przez pomiar potencjału przepływu. Tak więc, w ramach przeprowadzonych badań rozwinięto nowy model cząsteczki fibrynogenu oparty na układzie stykających się kul o różnej wielkości. Taka transformacja kształtu cząsteczki umożliwia przeprowadzenie obliczeń tensorów ruchliwości, dyfuzji oraz lepkości wewnętrznej dla różnych konformacji cząsteczki. Obliczenia te prowadzono w oparciu o liniowe równanie Stokesa, opisujące pole przepływu cieczy. Stosując formalizm sił indukowanych oraz tensor Oseena, jako funkcję Greena dla tej geometrii przepływu, równanie Stokesa zostało przekształcone do układu równań całkowych. Warto podkreślić, że w przeciwieństwie do poprzednich podejść teoretycznych, obliczenia przeprowadzone przez nas uwzględniają sprzężenie między ruchem translacyjnym, a rotacyjnym cząsteczki białka.

Przy użyciu tego podejścia wyznaczono średnicę hydrodynamiczną oraz lepkość wewnętrzną cząsteczki fibrynogenu, a także konformacje oraz rozkład ładunku elektrycznego w roztworach elektrolitów o różnym pH. Znając te parametry dokonano ilościowej interpretacji pomiarów kinetyki adsorpcji fibrynogenu przeprowadzonych przy pomocy metody potencjału przepływu (Rys. 1). Jak można zauważyć, dane doświadczalne pozostają w dobrej zgodności z wynikami teoretycznymi dla całego zakresu stężeń powierzchniowych fibrynogenu N_f . Warto też podkreślić, że dla $N_f < 3000 \mu\text{m}^{-2}$ stężenie powierzchniowe fibrynogenu jest opisywane liniową zależnością od pierwiastka z czasu adsorpcji. Ma to znaczenie praktyczne, gdyż umożliwia precyzyjne wyznaczenie współczynnika dyfuzji cząsteczek fibrynogenu lub jego stężenia objętościowego w zakresie ppm i poniżej, co jest utrudnione przy zastosowaniu metod spektrofotometrycznych.

Uzyskane wyniki mają też znaczenie poznawcze, wskazując, że dla niskich wartości pH cząsteczki fibrynogenu adsorbują się głównie w orientacji prostopadłej, co umożliwia efektywną immobilizację biocząstek (płytek krwi, czerwonych ciałek, bakterii) na warstewkach tego białka.



Rysunek 1. Kinetyka adsorpcji fibrynogenu na powierzchni miki w warunkach transport dyfuzyjnego. Punkty oznaczają wyniki doświadczalne uzyskane przy pomocy metody potencjału przepływu dla $c_b=10 \text{ mg L}^{-1}$, pH 3.5 oraz siły jonowej 10^{-2} M . Linia ciągła oznacza wyniki teoretyczne obliczone przy użyciu rozwiniętego w pracy modelu cząsteczki fibrynogenu.

2. Biokatalityczna synteza chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenową - teoria i eksperyment

Projekt badawczy MNiSW N N204 269038 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

Opracowywanie nowych metod biokatalitycznej syntezy chiralnie czystych alkoholi drugorzędowych ma duże znaczenie dla przemysłu chemii precyzyjnej oraz farmaceutycznego. Optycznie czyste alkohole są syntonami do produkcji bardziej skomplikowanych substancji bioaktywnych zawierających centrum chiralne. Metody biokatalityczne stanowią interesującą alternatywę dla tradycyjnych metod chemicznych ze względu na wysoką enancjoselektywność reakcji wynikającą z enancjo-różnicującej budowy centrum aktywnego enzymów.

W ramach ostatniego roku projektu badano możliwość aplikacji dehydrogenazy etylobenzenowej (EBDH) do produkcji chiralnych alkoholi na skalę przemysłową. Wcześniejsze badania wykazywały, że chociaż enzym wykazuje bardzo obiecujące właściwości, takie jak szerokie spektrum substratowe oraz wysoką enancjoselektywność hydroksylacji, to w warunkach reaktorowych jego aktywność zbyt szybko spada, by mógł być zastosowany do syntezy chemicznej. Dlatego przebadano wpływ immobilizacji enzymu na modyfikowanych nośnikach krzemionkowych i celulozowych na zachowanie aktywności EBDH w warunkach reaktorowych. Przebadano również dwa różne typy reaktorów: okresowe mieszalnikowe oraz przepływowe recyrkulacyjne ze złożem upakowanym w kolumnie.

Badania te, prowadzone przy współpracy z Politechniką Wrocławską i Politechniką Śląską, pozwoliły na wyselekcjonowanie nośnika celulozowego typu Granocel jako najbardziej obiecującego materiału do immobilizacji EBDH. Z kolei przeprowadzone testy reaktorowe oraz optymalizacja warunków reakcji umożliwiły 84-krotne wydłużenie czasu pracy reaktora okresowego z 4 godzin do 14 dni. Enzym pracujący w takich warunkach jest w stanie wyprodukować chiralne alkohole o stężeniu z zakresu 2-5 mM. Wykazano, że immobilizowany enzym jest w stanie szczególnie efektywnie przy zastosowaniu wysokiego (tj. np. 10 mM) stężenia heksacyjanożelazianu (III) potasu jako reutleniacza. Zastosowanie taniego $K_3[Fe(CN)_6]$ jako reutleniacza w miejsce tetrafluoroboranu ferrocenu (III) wyeliminowało również konieczność odtwarzania elektrochemicznego zredukowanego reutleniacza. Tym niemniej dla zastosowań farmaceutycznych, gdzie uzasadnione jest unikanie kontaktu z substancjami zawierającymi cyjanki, opracowano również metodę efektywnego odtwarzania ferrocenu zarówno w reaktorze okresowym jak i przepływowym (przepływowa cela elektrochemiczna).

Opracowana metoda syntezy stanowi treść polskiego zgłoszenia patentowego o numerze P.406286.

3. Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami

Projekt badawczy MNiSW N N204 269238 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Robert Socha)

W ciągu ostatnich lat obserwuje się wzrastające zainteresowanie mechanizmami wzrostu cienkowarstwowych układów epitaksjalnych typu tlenek metalu/metal, które stają się coraz ważniejsze w mikro- i nanoelektronice oraz w katalizie heterogenicznej. Nieliczne próby otrzymywania epitaksjalnych tlenków manganu (głównie MnO oraz Mn₃O₄) podjęte w okresie ostatnich kilku lat powodują, że w tym obszarze nauki wciąż istnieje możliwość syntezy układów o ciekawych właściwościach, odmiennych od właściwości układów występujących w naturze czy też syntezowanych w formie zdyspergowanej i często wykazujących znacznie podwyższoną selektywność.

W naszych badaniach skoncentrowaliśmy się na opracowaniu metodyki syntezy tlenków manganu i mieszanych tlenków żelaza i manganu oraz na badaniu właściwości katalitycznych tych tlenków. Epitaksjalne tlenki otrzymano poprzez utlenienie metalicznego manganu w podwyższonej temperaturze. Otrzymane struktury zostały scharakteryzowane z wykorzystaniem dyfrakcji niskoenergetycznych elektronów (LEED), dyfrakcji promieniowania X (XRD), spektroskopii elektronów Augera (AES), spektroskopii fotoelektronów generowanych promieniowaniem X (XPS), spektroskopią Mössbauera z wykorzystaniem elektronów konwersji (CEMS), skaningowa mikroskopia tunelowa (STM), temperaturowo programowaną desorpcją (TPD) i miareczkowaniem z wykorzystaniem analizy gazów resztkowych (RGA).

Syntezę spinelu Mn₃O₄(100) wykonano na epitaksjalnej warstwie Fe₃O₄(100) oraz MgO(100). Strukturę MnO(100) uzyskano na MgO(100) i W(100). Dodatkowo, Mn₂O₃(100) i MnO₂(100) uzyskano w wyniku syntezy na MgO(100). Tlenki MnO i Mn₃O₄ zostały zadotowane żelazem, w wyniku czego otrzymano mieszane tlenki manganu i żelaza. Stwierdzono, że powierzchnie wszystkich tlenków były wzbogacone w jony manganu na wyższym stopniu utlenienia (+3 lub +4) niż jony sieciowe, chociaż skład i struktura sieci były prawidłowe.

Katalityczną aktywność MnO badano na podłożu Pt(111). Na platynie osadzono 0.1, 0.3, 0.5, 1.0 i 5.0 ML manganu, po czym utleniono. Analiza LEED pokazała rekonstrukcję typu (19x1) dla MnO-podobnych struktur na Pt(111). Analiza XPS potwierdziła otrzymanie MnO. Reakcję miareczkowania prowadzono dla stałego ciśnienia tlenu ($5 \cdot 10^{-7}$, $1 \cdot 10^{-6}$ i $5 \cdot 10^{-6}$ mbar) i zmiennego CO w stałej temperaturze (373, 393, 423 i 473K). Reakcja miareczkowania pokazała istnienie zakresów ciśnienia niskiej i wysokiej reaktywności CO na powierzchni układu MnO/Pt. Stwierdzono, że obecność tlenku manganu na powierzchni Pt przesuwa zakres wysokiej reaktywności w kierunku wyższych ciśnień CO. Efekt ten był znaczący i wyższy od jednego rzędu wielkości ciśnienia CO. Wielkość pokrycia tlenkiem manganu była krytyczna dla utleniania CO poniżej 0.5 ML. Obserwowany efekt zaniknął dla wyższych pokryć. Po wprowadzeniu 0.1 ML żelaza do układu katalitycznego (0.3 ML Mn), tlenek mieszany wykazał podwyższenie odporności na zatrucie CO.

Przedstawione badania pokazały nowy sposób syntezy mieszanego tlenku żelazowo manganowego o strukturze spinelu. Sposób ten może zostać wykorzystany do otrzymania układów o specyficznych właściwościach magnetycznych i katalitycznych. Badania katalityczne wykazały pozytywną rolę małych ilości tlenku manganu i/lub żelaza na regenerację zatrutej powierzchni Pt(111). Ta właściwość może zostać wykorzystana w syntezie aktywnych katalizatorów.

4. Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych (SOFC) pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro

Projekt badawczy MNiSW N N507 616638 [2010-2013]

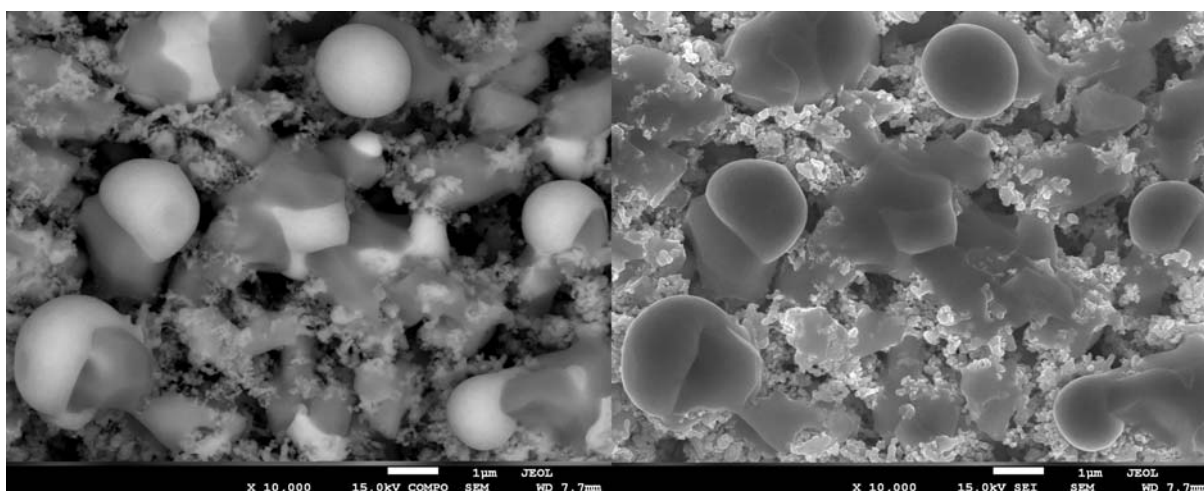
(kierownik projektu: dr Michał Mosialek)

Stało-tlenkowe wysokotemperaturowe ogniwa paliwowe (SOFCs) mogą stać się przyjaznymi dla środowiska źródłami energii elektrycznej o wysokiej sprawności. W ostatnich latach znaczny wysiłek został włożony w obniżenie temperatury pracy tych ogniw do zakresu 500-700°C. Poważnym problemem w konstrukcji SOFC jest wysoki nadpotencjał reakcji redukcji tlenu. Jednym ze sposobów rozwiązania tego problemu jest dodanie srebra do materiału katodowego. Nasze badanie skupiają się na możliwości zastosowania metalicznego srebra jako materiału na kompozytowe katody pracujące w temperaturach poniżej 600°C.

W roku 2013 był kontynuowane dwa ostatnie etapy projektu: "Określenie stabilności chemicznej otrzymanych kompozytowych materiałów katodowych w stosunku do obecnie stosowanych w ogniwach paliwowych elektrolitów i interkonektorów. Analiza zmian zachodzących w złączu materiał katodowy|elektrolit podczas długotrwałej pracy ogniwa paliwowego" oraz "Wykonanie pomiarów elektrochemicznych w celu określenia charakterystyki reakcji redukcji tlenu na złączach materiał kompozytowy zawierający srebro | elektrolit tlenkowy".

Stwierdzono brak oddziaływania otrzymywanych materiałów kompozytowych z elektrolitami: $\text{Sm}_{0.2}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_{1.9}$ (SDC), $\text{Gd}_{0.2}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_{1.9}$ (GDC) oraz $\text{Y}_{0.8}\text{Zr}_{0.92}\text{O}_{2-d}$ (YSZ). Stwierdzono zachodzenie oddziaływań pomiędzy stałą chromową SUS430, stosowaną powszechnie do wytwarzania konektorów, a kompozytowymi materiałami Ag-LSCF i Ag-LSM. Po tygodniowych testach stwierdzono znaczną ilość chromu w badanych materiałach kompozytowych (Rys. 1).

Wykonane zostały kompozytowe katody Ag- $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ (SSC), Ag- $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ (LSM) na elektrolicie SDC. Wykonano pomiary impedancji elektrod metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej (ESI) w ogniwach $\text{O}_2|\text{Ag-SSC}|\text{SDC}|\text{Ag-SSC}|\text{O}_2$ oraz $\text{O}_2|\text{Ag-LSM}|\text{SDC}|\text{Ag-LSM}|\text{O}_2$ w zależności od stężenia tlenu w mieszaninie z argonem w temperaturach 700°C–500°C, przy szybkościach przepływu gazu 28-150 ml/min.



Rysunek 1. Obraz mikrostruktury (SEM) kompozytowej elektrody Ag-LSCF. Po lewej stronie zdjęcia zrobione w trybie COMPO a po prawej w trybie SEI. Elektroda wygrzewana przez 144 godziny w obecności interkonektora. Białe kule – Ag, ciemne krystality obok białych kul zawierają Cr i Ag.

5. Stabilność, funkcjonalność i mechanizm tworzenia wielowarstwowych struktur polimerowo-kazeinowych

Projekt badawczy MNiSW N N204 546639 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Głównym celem naukowym projektu było zbadanie mechanizmu tworzenia i stabilności wielowarstwowych filmów polielektrolitowych zawierających kazeinę i określenie stopnia zachowania aktywności biologicznej wbudowanej kazeiny.

Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe budowano z wykorzystaniem sekwencyjnej adsorpcji warstw polielektrolitowych (LbL) na podkładkach krzemowych Si/SiO₂, na kryształach QCM lub na kryształach germanowych (pomiar FTIR). Analiza otrzymanych danych doświadczalnych pokazała, że multiwarstwowe filmy kazeinowe budowane z poli-L-argininą (PLArg) są grubsze o ok. 50 % niż te budowane z poli-L-lizyną (PLL), oraz że filmy suche są dwa razy cieńsze niż te same filmy w kontakcie ze środowiskiem wodnym. Okazało się również, że filmy budowane z α -kazeiną tworzą grubsze warstwy niż te budowane z β -kazeiną zarówno w parze z PLL jak i PLArg. Filmy analizowane były także pod kątem ich grubości, struktury, stabilności w różnych warunkach fizykochemicznych oraz zdolności do adsorpcji wapnia. Analiza wyników otrzymanych z elipsometrii i QMC-D pokazała, że filmy kazeinowe budowane z PLL są niestabilne w roztworach kwaśnych i silnie zasadowych oraz w roztworach o sile jonowej większej niż 0.75M NaCl. Natomiast filmy kazeinowe budowane z PLArg wykazują dużo większą stabilność w roztworach zasadowych oraz nie są wrażliwe na zmiany siły jonowej roztworów. W silnie kwaśnym środowisku (pH 2) niestabilność filmów była spowodowana dodatnim ładunkiem obydwu kazein, PLL, PLArg oraz dodatnim ładunkiem krzemu. Brak elektrostatycznych oddziaływań powoduje zmywanie się filmów z podkładki krzemowej. Z kolei w silnie zasadowym środowisku (pH 11) filmy PLL/kazeinowe były niestabilne z powodu niskiego ładunku łańcuchów PLL. Przy pH 4 mimo, że łańcuchy białka α -kazeiny posiadają słaby ładunek dodatni, zawierają także regiony naładowane ujemnie, które w kombinacji z oddziaływaniami hydrofobowymi przyczyniają się do stabilności tych filmów. W tych samych warunkach (pH4) filmy z β -kazeiną są mniej stabilne z powodu wyższego, dodatniego ładunku białka. W warunkach naturalnych i lekko zasadowych, filmy zawierające obydwa typy kazeiny są stabilne, co stanowi ważną informację dla potencjalnych możliwości zastosowania filmów kazeinowych do modyfikacji powierzchni materiałów wykorzystywanych np. jako implanty dentystyczne. Z kolei wartości pH, które powodują degradację filmów kazeinowych mogą być czynnikiem służącym do uwalniania składników aktywnych zamkniętych w powłokach kazeinowo/polielektrolitowych.

Analiza widm FTIR badanych filmów pokazała, że adsorpcja filmów na podkładkach krzemowych i suszenie powoduje przesunięcie położenia maksimum pasma wiązań amidowych I tylko o 14 cm⁻¹ w kierunku wyższych liczb falowych fal, co wskazuje na niewielkie zmiany strukturalne białka. Obecność reszt fosforynowych w łańcuchu polipeptydowym stwarza możliwości wiązania jonów wapniowych, jednakowoż w widmach FTIR filmów kazeinowych nie stwierdzono przesunięcia pików w rejonie wiązań 1228cm⁻¹ i 1085cm⁻¹, które odpowiadają antysymetrycznym rozciągającym drganiom grup fosforowych PO₂⁻ wskazującego na wiązanie wapnia. Z drugiej strony za pomocą analizy spektroskopii rentgenowskiej udało się uzyskać wyniki świadczące o obecności jonów wapniowych w filmach kazeinowych po ich kondycjonowaniu w roztworach soli wapniowych. Również, analiza topologii powierzchni filmów prowadzona za pomocą AFM wykazała jej istotne zmiany pod wpływem traktowania roztworami zawierającymi jony wapniowe można więc zakładać, że kazeina zachowuje swoje właściwości biologiczne.

6. Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego

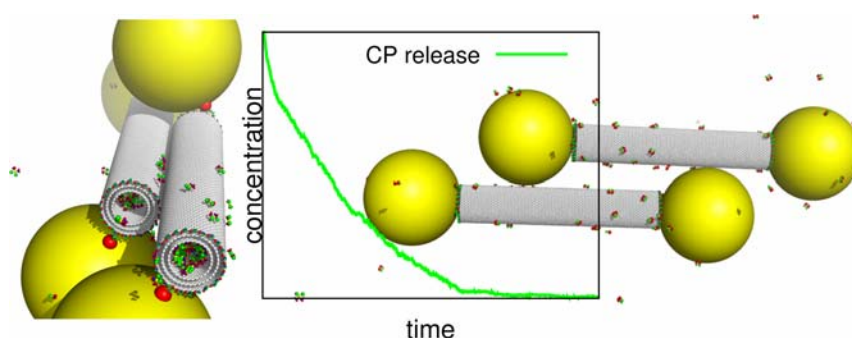
Projekt badawczy MNiSW N N204 205240 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr hab. Tomasz Pańczyk prof IKiFP)

Przeprowadzono badania właściwości układu wielu nanopojemników molekularnych w środowisku o parametrach płynu fizjologicznego (roztwór 0.145 mol L^{-1} NaCl w wodzie), Rys. 1. Badania miały na celu określenie wpływu oddziaływań międzycząsteczkowych na: stabilność suspensji nanopojemników w środowisku wodnym, stabilność stanu zamkniętego w przypadku zderzeń międzycząsteczkowych, efektywność magnetycznie wyzwalanego otwierania nanopojemników oraz dynamiki uwalniania leku (cisplatyny) z wnętrza nanopojemników.

W tym celu wykorzystano model i pole siłowe opracowane w ramach wcześniejszych zadań badawczych pozwalające na badanie tych zjawisk przy użyciu dynamiki molekularnej. Szczegółowym badaniom poddano stabilność stanu zamkniętego nanopojemnika, zawierającego we wnętrzu molekule cisplatyny, w sytuacji, gdy dochodzi do zderzeń pomiędzy nanopojemnikami w roztworze. Modelowano w tym celu różne trajektorie zderzeń z różnymi energiami (temperaturami) w momencie kolizji. Analizie poddano również efektywne energie oddziaływań międzycząsteczkowych ustalające się po uzyskaniu przez układy stanu stacjonarnego. Wpływ kierunku pola magnetycznego na stopień otwarcia w układzie nanopojemników badano analizując szerokość szczelin pomiędzy powierzchniami nanocząstek magnetycznych a krawędziami nanorurek.

Wyniki uzyskane w ramach badań pozwalają stwierdzić, że: w warunkach normalnych (tj. w temperaturach rzędu 300-310K) zderzenia nanopojemników nie prowadzą do destrukcji stanów zamkniętych i nie dochodzi do niekontrolowanego przeciekania cząsteczek zamkniętych w ich wnętrzach, natomiast w wyższych temperaturach (400-600K) takie zjawiska mogą zaistnieć. Aktualny stan chemiczny nanopojemnika, tj. hydrofobowe ścianki nanorurek i hydrofilowe czola nie zapewniają stabilności koloidalnej w roztworze, potrzebne są dalsze modyfikacje prowadzące do zredukowania oddziaływań hydrofobowych. Magnetycznie indukowane procesy otwierania zachodzą w układach nanopojemników a zatem oddziaływania międzycząsteczkowe nie mają wpływu na przebieg tych procesów. Uwalnianie cisplatyny, wskutek magnetycznie wyzwalanego otwarcia, zachodzi według mechanizmu aktywowanej dyfuzji jednowymiarowej. Stwierdzono jednak, że w przypadku nanorurek o małej średnicy wewnętrznej i dużej gęstości leku we wnętrzu, może dochodzić do zjawiska ‘wrywania’ cząsteczek leku przez nanocząstki magnetyczne. Obserwuje się wówczas obszar pozornej dyfuzji nieaktywowanej i krzywa procesu uwalniania składa się z dwóch wyraźnie zaznaczonych gałęzi, jak pokazano na Rys. 1.

Uzyskane wyniki potwierdzają użyteczność rozważanego układu w dziedzinie nanomedycyny jako nośnika leków o zdolności do wyzwalania procesu uwalniania leku pod wpływem oddziaływania z zewnętrznym polem magnetycznym.



Rysunek 1. Układ dwóch nanopojemników molekularnych oraz krzywa dynamiki uwalniania cisplatyny z wnętrza układu nanopojemników.

7. Wpływ mikro- i nano-pęcherzyków na powierzchniach hydrofobowych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych

Projekt badawczy MNiSW N N204133640 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem projektu jest zbadanie wpływu (i) zdefiniowanej szorstkości powierzchni ciała stałego oraz (ii) obecności sub-mikronowych pęcherzyków powietrza na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) ciecz/gaz/ciało stałe. W okresie sprawozdawczym badano kinetykę powstawania TPC podczas zderzeń pęcherzyka z hydrofilowymi oraz hydrofobizowanymi powierzchniami porowatych spieków szklanych o zdefiniowanej średnicy porów, mieszczącej się w przedziale 16-40 μm . Ruch pęcherzyka o promieniu $R_b=0.74$ mm oraz kinetyka jego zderzeń z powierzchnią porowatą monitorowane były przy użyciu szybkiej kamery cyfrowej. Odległość pomiędzy punktem formowania się pęcherzyka (otworem kapilary) a powierzchnią międzyfazową ustawiona była tak, aby pęcherzyk, uderzając w powierzchnię, był w fazie przyspieszenia i posiadał prędkość mniejszą niż prędkość graniczna (~ 20 cm/s). Powierzchnie porowate przygotowywane były według opracowanej procedury, pozwalającej na (i) usuwanie powietrza obecnego w porach i na powierzchni ("no-air") lub (ii) efekt odwrotny, polegający na wytworzeniu niewielkiego nadciśnienia (< 1 kPa) wymuszającego obecność powietrza w postaci sub-mikronowych pęcherzyków w porach i na badanej powierzchni ("air"). Wykazano, że obecność powietrza na badanych powierzchniach znacząco zmieniała kinetykę zderzeń pęcherzyka oraz czas potrzebny do jego unieruchomienia (rozproszenia energii kinetycznej) pod powierzchnią międzyfazową ciecz/ciało stałe. W przypadku hydrofilowych powierzchni porowatych, usunięcie powietrza (przypadek "no-air") powodowało, iż do całkowitego rozproszenia energii kinetycznej związanej z ruchem pęcherzyka dochodziło przy czwartym zderzeniu, po około 45 ms. W przypadku powierzchni "air" rozproszenie energii następowało znacząco szybciej, już po około 25 ms. Ponadto amplituda odbić pęcherzyka była większa w przypadku "no-air" niż "air". Obserwowano także charakterystyczne przesunięcie zależności zmian położenia oraz prędkości pęcherzyków w czasie, w kierunku czasów krótszych, w przypadku "air". W celu uzyskania dodatkowych dowodów na to, że obecność powietrza istotnie wpływa na kinetykę zderzeń pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego, przeprowadzono obliczenia numeryczne. W symulacjach pęcherzyk uderzał w powierzchnię, na której znajdował się (axi-symetrycznie) pojedynczy por wypełniony powietrzem w postaci pęcherzyka, którego wysokość wynosiła 11,4 μm . Uzyskano dobrą zgodność wyników obliczeń numerycznych i eksperymentów. Na podstawie przeprowadzonych obliczeń i badań stwierdzono, że za zmianę kinetyki odbić i szybsze rozproszenie energii kinetycznej na powierzchni "air" odpowiada mechanizm związany z tworzeniem się tzw. "mostków" powietrznych, powstających podczas zderzenia makro-pęcherzyka z obecnymi na porowatej powierzchni mikro-pęcherzykami. Szybsze rozproszenie energii spowodowane jest występowaniem sił kapilarnych, obecnych pomiędzy makro-pęcherzykiem a powierzchnią ciała stałego na skutek pęknięcia ciekłego (wodnego) filmu, oddzielającego uderzający pęcherzyk oraz mikro-pęcherzyk wystający z porów powierzchniowych. Na powierzchniach hydrofobizowanych obserwowano bardzo podobny efekt. Tutaj jednak, ze względu na hydrofobowość powierzchni, mierzonym parametrem był czas potrzebny do utworzenia kontaktu trójfazowego (t_{TPC}). W przypadku "no-air" utworzenia kontaktu trójfazowego następowało podczas drugiego zderzenia, podczas gdy dla powierzchni "air" podczas pierwszego, tj. t_{TPC} ulegał skróceniu z około 22 ms do około 2 ms.

8. Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji transmetalacji porfiryny i jej wybranych pochodnych

Projekt badawczy MNiSW N N204 439640 [2011-2014]

(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Celem niniejszego projektu jest zbadanie mechanizmu transmetalacji porfiryny magnezu i jej wybranych pochodnych (chloryny, chlorofilu) jonami miedzi(II) i cynku(II). Badana reakcja z jednej strony modeluje proces wymiany magnezu w chlorofilu jonami metali ciężkich (głównie Cu(II)), który zachodzi w roślinach rosnących na zanieczyszczonych glebach, z drugiej zaś jest jednym ze sposobów otrzymywania metaloporfiryn z różnymi metalami centralnymi.

Przedstawione badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą DFT (Teoria Funkcjonałów Gęstości) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z zastosowaniem przybliżenia R_i , zaimplementowanego w programie Turbomole. Badania teoretyczne uzupełniano pomiarami kinetyki reakcji w roztworach, monitorowanymi przy pomocy spektroskopii UV-Vis.

Kontynuowano badania nad mechanizmem wymiany magnezu na jon drugiego metalu (Cu(II), Zn(II)), kładąc szczególny nacisk na określenie czynników kontrolujących efektywność procesu metalacji.

Stwierdzono, że jednym z kluczowych parametrów kontrolujących inicjację procesu transmetalacji związków - pochodnych porfiryn magnezu - przez jony miedzi jest zmniejszona liczba koordynacyjna jonu Mg(II). Ponadto, przebadany mechanizm transmetalacji wskazuje na zależność stałej szybkości reakcji od rodzaju rozpuszczalnika, w którym badana reakcja przebiega. Siła oddziaływania jon magnezu-cząsteczka rozpuszczalnika może modulować jego efektywność, co pozostaje w zgodzie z dostępnymi danymi doświadczalnymi.

Kolejnym czynnikiem silnie wpływającym na szybkość badanej reakcji jest rodzaj użytego jonu chelatującego, który aktywuje jon magnezu. Bazując na dotychczasowych wynikach doświadczeń wybrano dwa ligandy chelatujące: octan i acac. Przeprowadzone badania wskazują, że wpływ liganda chelatującego jest dwojaki:

- Geometryczny: przyłączenie liganda chelatującego do jonu Mg(II) powoduje wygięcie pierścienia tetrapirolowego oraz wysunięcie jonu Mg(II) ponad płaszczyznę. Ułatwia to nadchodzącemu jonowi miedzi wiązanie z azotem tetrapirołu. Miarą deformacji tetrapirołu jest wysunięcie Mg out-of-plane, większe dla acac, mniejsze dla octanu.
- Elektronowy: pod wpływem przyłączenia ligandu chelatującego do jonu magnezu następuje zwiększenie nukleofilowości pierścieni azotu w tetrapirołu. Ułatwia to atak elektrofilowy nadchodzącego jonu Cu(II). Nukleofilowość azotów tetrapirołu mierzono poprzez wyznaczenie ładunków ESP, odpowiadających wytwarzanemu potencjałowi elektrostatycznemu przez dany atom. Tu silniejszy jest wpływ octanu niż acacu.

Najprawdopodobniej nie bez znaczenia jest również wzajemna konformacja chlorofilu i jego potencjalnych ligandów (rozpuszczalnika i chelatora), czyli preferencja jak chodzi o "stronę" pierścienia, do której ligandy magnezu się chcą przyłączyć. Ligand chelatujący (octan) preferuje wiązanie "od góry", a cząsteczka rozpuszczalnika "od dołu" (tzn. od strony fitolu) pierścienia chlorofilowego. Obserwacja ta poczyniona została na modelu obejmującym cząsteczkę feofityny bez fitolu, zatem wymaga jeszcze potwierdzenia poprzez rozszerzenie zastosowanego modelu teoretycznego o łańcuch fitolu.

9. Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności

Projekt badawczy MNiSW N N204 439040 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr inż. Jakub Barbasz)

Projekt realizowany zgodnie z harmonogramem. Prowadzono badania nad mieszaniną dwóch białek adsorbujących się równolegle.

Badania mają na celu wyjaśnienie mechanizmu adsorpcji równoległej oraz opracowanie teorii dobrze opisującej wyniki doświadczalne.

Rozwijano model kinetyki powstawania warstwy będący w dobrej zgodności z wynikami doświadczalnymi.

Przeprowadzono charakterystykę objętościową białek (ludzka albumina osoczowa (HSA) i fibrynogen).

Określono rozmiary, ładunki powierzchniowe, ruchliwość elektroforetyczną (przykład) oraz stabilności roztworów w zależności od stężenia oraz siły jonowej.

Prowadzono badania mikroskopią AFM w warunkach mokrych.

10. Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek

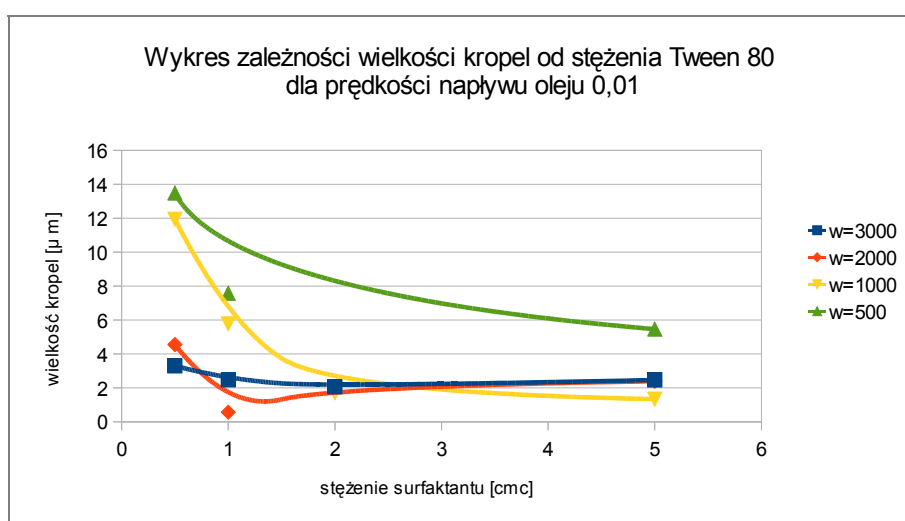
Projekt badawczy MNiSW N N209 757340 [2011-2014]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych efektywnej metody otrzymywania stabilnych kropli emulsji o kontrolowanych rozmiarach metodą emulsyfikacji membranowej, które następnie zostaną wykorzystane jako rdzenie do wytworzenia mikrokapsulek. Zastosowanie emulsyfikacji membranowej przy odpowiednim doborze materiału membrany, jej porowatości i średniego rodzaju porów oraz surfaktantów czy polielektrolitów umożliwi otrzymywanie monodispersyjnych zawiesin o kontrolowanym rozmiarze kropli przy niskim nakładzie energii, co powinno umożliwić produkcję kapsulek na skalę przemysłową. Dla zademonstrowania skuteczności metodyki wytwarzania mikrokapsulek za pomocą emulsyfikacji membranowej planujemy określenie warunków enkapsulacji dla związków modelowych jak i dla wybranych czynników aktywnych.

W 2013 roku skupiono się na kolejnym zadaniu projektu dotyczącym procesu tworzenia emulsji metodą emulsyfikacji membranowej za pomocą zbudowanego w naszym Instytucie urządzenia. Przeprowadzono szereg badań dotyczących wpływu wielkości siły ścinającej na wielkość kropli olejowych powstających w układzie rzeczywistym jakim jest emulsyfikator membranowy. Krople wytwarzane były na ceramicznej membranie o wielkości porów 4 mikrony. Świeżo wytworzona emulsja analizowana była pod kątem wielkości kropli oraz jej stabilności metodami Dynamicznego Rozpraszania Światła oraz bezpośredniej obserwacji mikroskopowej. Zbadano również wpływ stężenia i rodzaju surfaktantu na właściwości otrzymanej emulsji. (surfaktant anionowy SDS, kationowy DTABr oraz niejonowy Tween 80) Rysunek 1 przedstawia zależność wielkości wytworzonej kropli emulsyjnej od stężenia surfaktantu użytego podczas procesu emulsyfikacji.

W dalszym etapie emulsyfikacja membranowa będzie wykorzystana do enkapsulacji czynników antykorozyjnych. Kapsułki takie mogą być użyte w "inteligentnych" powłokach antykorozyjnych, t.j. w których środek antykorozyjny jest uwalniany w przypadku uszkodzenia powłoki.



Rysunek 1. Wykres zależności wielkości kropli emulsji od stężenia surfaktantu (Tweenu 80) oraz od wielkości siły ścinającej.

PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE MNiSW

1. Wpływ surfaktantów kationowych i pH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości

Projekt badawczy promotorski MNiSW N N204 179439 [2010-2014]

(promotor: prof. Kazimierz Małyś, doktorant: mgr inż. Anna Niecikowska)

Celem projektu jest określenie wpływu surfaktantów kationowych i pH środowiska na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego w trakcie kolizji pęcherzyków gazowych z powierzchniami ciał stałych o niskiej hydrofobowości. Kontakt trójfazowy gaz/ciecz/ciało stałe powstaje, jeżeli film ciekły zostaje przerwany w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego. Stabilność filmów zwilżających jest determinowana przez szereg czynników, z których najistotniejszymi są właściwości hydrofilowo/hydrofobowe powierzchni ciała stałego, szorstkość powierzchni, obecność substancji powierzchniowo aktywnych zaadsorbowanych na granicach międzyfazowych filmu (ich rodzaj i stężenie), oraz stan elektryczny obu powierzchni międzyfazowych. Oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy powierzchniami międzyfazowymi ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe mogą stabilizować lub destabilizować film zwilżający na powierzchniach o niskiej hydrofobowości, a właściwości elektryczne powierzchni roztwór/gaz roztwór/ciało stałe mogą być modyfikowane poprzez adsorpcję substancji powierzchniowo aktywnych oraz pH środowiska. W wyniku wykonanych badań wykazano, że preferencyjna adsorpcja kationowych surfaktantów (bromki n-alkiltrimetyloamoniowe - C8, C12, C16) na ujemnie naładowanej powierzchni pęcherzyka powoduje destabilizację (przerwanie) filmu zwilżającego i utworzenie kontaktu trójfazowego na hydrofilowej, ujemnie naładowanej powierzchni miki. Ponadto, czas powstawania kontaktu trójfazowego zależał silnie od stężenia roztworu i stanu warstwy adsorpcyjnej na powierzchni w momencie kolizji. Gdy dynamiczna architektura warstwy adsorpcyjnej (DAL), tzn. nierównomierne rozłożenie pokrycia adsorpcyjnego, była utworzona na powierzchni pęcherzyka wtedy czas powstawania kontaktu trójfazowego był dłuższy. To wydłużenie czasu, gdy w momencie kolizji na powierzchni pęcherzyka jest uformowana DAL wynika z faktu, że dodatkowy czas jest niezbędny, aby na górnym biegunie pęcherzyka zostało przywrócone takie pokrycie kationowym surfaktantem, które powoduje zmianę ładunku z ujemnego na dodatni i zdestabilizuje powstały film zwilżający.

W okresie od 1 stycznia do 26 października 2013 roku doktorantka przebywała nadal na urlopie macierzyńskim i dlatego termin zakończenia grantu został przesunięty (za zgodą NCN) na 2014 r. W okresie sprawozdawczym doktorantka opracowywała uzyskane wcześniej wyniki swoich badań, czego efektem są 1 publikacja wysłana do druku oraz 3 postery przedstawione na międzynarodowych konferencjach, których jest współautorem.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA BIS"

1. Wspomagane komputerowo projektowanie i przewidywanie właściwości nośników leków opartych na strukturze nanorurek węglowych

Projekt badawczy "Sonata Bis" NCN 2012/07/E/ST4/00763 [2013-2017]

(kierownik projektu: dr hab. Tomasz Pańczyk prof. IKiFP PAN)

Nanorurki węglowe (CNT) wykazują szereg cech wskazujących na ich użycie w roli nośników leków. Są to m.in. duża pojemność wewnętrzna, wysoka wytrzymałość oraz wysoki stosunek długości do średnicy (tzw. aspect ratio), co sprawia, że CNT z łatwością przenikają przez błony komórkowe, jak również, są w stanie docierać do jądra komórki. Potencjalna toksyczność nanorurek, czy ich hydrofobowość może być kontrolowana przez redukcję rozmiarów oraz funkcjonalizację chemiczną. Jednakże, niemodyfikowane nanorurki węglowe nie wykazują użytecznych cech inteligentnych nośników leków. Dlatego poszukuje się różnorodnych opcji (fizycznych lub chemicznych) modyfikacji nanorurek węglowych w celu nadania im odpowiednich właściwości. Celem projektu jest, zatem zbadanie kilku koncepcji teoretycznych, które mogą prowadzić do uzyskania materiałów o wyjątkowych cechach.

W pierwszym etapie realizacji projektu skupiono się na stworzeniu warsztatu badawczego polegającego na opracowaniu metodyki modelowania oddziaływań nanorurek węglowych z ligandami organicznymi oraz nanocząstkami koloidalnymi, które dodatkowo mogą wykazywać właściwości superparamagnetyczne. Jako ligand organiczny wybrano na tym etapie badań czerwień kongo, która ma zdolność do tworzenia taśmowych struktur supramolekularnych w roztworach wodnych. W kolejnym etapie badań zostanie przeprowadzona analiza kompleksów czerwień kongo-nanorurka węglowa jako jeden z możliwych przypadków hydrofilizacji ścianek bocznych nanorurek węglowych zależnych od pH środowiska. Opracowano metodykę charakteryzacji struktury przestrzennej micel taśmowych czerwień kongo. Jest to ważny parametr pozwalający na analizę zmian strukturalnych wskutek zaistnienia oddziaływań z nanorurka węglową. Dzięki analizie tego parametru możliwe jest śledzenie odchyleń od geometrii planarnej cząsteczki i wyznaczenie statystyki tych odchyleń w funkcji parametrów układu. Innym aspektem badawczym było opracowanie metodyki analizy oddziaływań nanorurek węglowych z nanocząstkami koloidalnymi wykazującymi właściwości superparamagnetyczne. Na tym etapie badań skupiono się na jednym z najważniejszych parametrów takich cząstek, tj. wpływu ich obecności i parametrów fizykochemicznych na czas relaksacji T_2 . Opracowano nowatorską i nieopisywaną dotychczas w literaturze metodę wyznaczania czasu T_2 przy wykorzystaniu dynamiki molekularnej. Pozwala to na zbadanie wpływu takich parametrów jak potencjał zeta, stała Hamakera, stała anizotropii magnetycznej, obecność grup funkcyjnych czy adsorpcja wody na powierzchni cząstek. Wszystkie te czynniki mogą mieć wpływ na efektywność nanocząstek jako czynników kontrastowych w jądrowym rezonansie magnetycznym, co więcej, istotne będzie zbadanie jak kompleksy nanorurka węglowa-cząstka superparamagnetyczna wpływają na sygnał MRI.

Wyniki uzyskane w pierwszym etapie realizacji projektu mają głównie znaczenie poznawcze. Opracowana metodyka badań pozwala na analizę badanych układów pod kątem ich zastosowania jako układy dostarczania leków i jednocześnie jako układy diagnostyczne.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA"

1. Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/01/D/HS2/02604 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Marcin Strojecki)

W okresie sprawozdawczym rozpoczęto zgodnie z harmonogramem długookresowe monitorowanie warunków mikroklimatycznych oraz poziomu zapylenia w dwóch frakcjach (0.3-1.0 μm oraz powyżej 1.0 μm) w 3 nowych kościołach:

- XIV-wiecznej gotyckiej bazylice kolegiackiej Narodzenia Najświętszej Marii Panny w Wiślicy z ogrzewaniem promiennikowym,
- XX-wiecznym neogotyckim kościele św. Józefa w Krakowie-Podgórzu z ogrzewaniem podławkowym,
- XIII-wiecznej gotyckiej Bazylice Mariackiej w Krakowie z piecami akumulacyjnymi.

Te trzy nowomonitorowane kościoły oraz pozostałych 7 monitorowanych w poprzednim roku stanowią razem 10 kościołów zaplanowanych w projekcie. Ponadto w trzech kościołach, w których rozpoczęto monitorowanie w ubiegłym roku, tj.:

- XIII-wiecznym kościele p.w. Wniebowzięcia NMP i św. Wacława w Krakowie-Mogile z ogrzewaniem nadmuchowym z posadzki,
- XV-wiecznym gotyckim kościele św. Katarzyny Aleksandryjskiej w Krakowie z ogrzewaniem promiennikowym,
- XX-wiecznej cerkwi metropolitalnej św. Marii Magdaleny w Warszawie z ogrzewaniem centralnym

Pomiary prowadzono również w kolejnym okresie sprawozdawczym w celu poprawy statystyki wyników. We wszystkich wyżej wymienionych lokalizacjach system pomiarowy składał się z przynajmniej 2 czujników zapylenia rozmieszczonych w różnych lokalizacjach w profilu wertykalnym, 2 czujników temperatury i wilgotności względnej powietrza, czujnika prędkości i kierunku ruchu powietrza oraz czujnika stężenia CO₂. Oprócz monitorowania stężenia pyłu zawieszonego wewnątrz obiektów mierzono również stężenie pyłu na zewnątrz budynków oraz temperatura i wilgotność względna powietrza na zewnątrz.

Równoległe z długookresowym monitorowaniem prowadzone są krótkookresowe pomiary (ok. tygodnia) przy użyciu monitora stężenia aerozolu DustTrak DRX 8533(TSI), który mierzy wagową zawartość pyłu w 5 frakcjach wielkościowych: PM1, PM2.5, PM4, PM10 oraz TPM (całkowita ilość pyłu). Dodatkowo, osadzony na filtrze pył oraz makroskopowe próbki kurzu pobrane z różnych lokalizacji w monitorowanych kościołach poddawane są analizie chemiczno-morfologicznej. Wstępne porównanie wyników grawimetrycznego pomiaru prowadzonego w kościele św. Katarzyny Aleksandryjskiej w Krakowie wykonane przy pomocy tego urządzenia potwierdza bardzo dobrą zgodność pomiaru masy (po odpowiednim przeliczeniu) wykonaną przy pomocy laserowych czujników stężenia pyłu zawieszonego.

Wyniki monitoringu w 4 kościołach, w których w okresie sprawozdawczym zakończono pomiary są poddane szczegółowej analizie obejmującej następujące zagadnienia: określenie szybkości wymiany powietrza między przestrzenią zewnętrzną i wnętrzem, oraz związana z tą wymianą infiltracja pyłu zawieszonego, wewnętrzne źródła zapylenia, zwiększenie turbulencji przepływu powietrza we wnętrzu oraz podnoszenie osadzonego pyłu w wyniku użytkowania kościoła oraz mechanizmy osadzania pyłu na powierzchniach architektonicznych.

2. Nowe katalizatory Pd-Pt/ nanokompozyt hybrydowy do redukcji tlenu w polimerowym ogniwie paliwowym

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/01/D/ST5/04917 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Monika Góral-Kurbiel)

Tematyka prowadzonych badań dotyczy polimerowych ogniw paliwowych, w których surowcami do wytworzenia energii elektrycznej są wodór i tlen. Rozwój technologii ogniw paliwowych wynika z ich licznych zalet, m.in. nie przyczyniają się one do pogłębienia efektu cieplarnianego, a produktem ubocznym ich pracy jest woda. Jednakże komercjalizacja ogniw paliwowych napotyka na duże bariery wynikające ze zbyt wysokiego kosztu wytworzenia energii i zbyt niskiej stabilności pracy. Celem obecnego projektu są badania nad elektrokatalizatorami do reakcji redukcji tlenu, ORR (*ang. Oxygen Reduction Reaction*) na katodzie w ogniwie paliwowym zasilanym bezpośrednio metanolem. Planowane jest zastosowanie polimeru przewodzącego, polipirolu, PPY, zawierającego zdyspergowane nanocząstki Pd, Pt i Pd-Pt. Dodatkowo polipirol będzie modyfikowany przez wprowadzenie heteropolikwasów typu Keggina i Dawsona. Zastosowanie układu bimetalicznego Pd-Pt w miejsce powszechnie stosowanej Pt ma na celu zwiększenie odporności katalizatora na zatrucie przez tlenek węgla i metanol, przy zachowaniu aktywności centrów metalicznych oraz zmniejszenie kosztów produkcji. Użycie jako nośnika kompozytu hybrydowego zawierającego heteropolikwasy osadzone w PPY ma zapewnić dobry transfer elektronów i protonów.

Badania przeprowadzone w 2013 roku obejmowały przygotowanie, charakteryzację właściwości fizykochemicznych katalizatorów palladowych i platynowych oraz badanie ich elektroaktywności w ORR. W szczególności przedmiotem badań był wpływ jonomeru Nafionu (stosowanego jako czynnik wiążący) na elektroaktywność otrzymanych katalizatorów. Zastosowanie metody mikroemulsji odwróconej (*ang. water-in-oil microemulsion*) umożliwiło syntezę katalizatorów o wąskim zakresie wielkości kryształitów palladu, ok. 7 nm niezależnie od zawartości palladu od 2 do 20% (w/w). Użycie Nafionu spowodowało zmniejszenie powierzchni właściwej i porowatości próbek Pd/PPY. Oddziaływania chemiczne związane z kwasowymi grupami funkcyjnymi Nafionu wpłynęły zarówno na stan azotowy pirolu jak też na stan elektronowy Pd w katalizatorach Pd/PPY. Te oddziaływania odegrały zasadniczą rolę w elektroaktywności Pd/PPY w reakcji redukcji tlenu. W celach porównawczych zsyntetyzowano również katalizatory palladowe osadzone na nośniku węglowym typu Vulcan XC-72. Wraz ze wzrostem ilości Nafionu w stosunku do obydwu nośników zmniejszyła się gęstość prądu granicznego. W przypadku Vulcanu XC-72 jednocześnie wzrósł udział niepożądanego produktu nadtlenu wodoru. Natomiast, gdy jako nośnika użyto PPY, potencjał redukcji tlenu przesunął się w stronę dodatnich wartości, a ilość produkowanego nadtlenu wodoru była znacznie niższa. Najprawdopodobniej było to spowodowane zmianą reaktywności centrów Pd w wyniku obecności Nafionu.

Wpływ oddziaływania Nafion-Pd, Nafion-Pt na reakcję redukcji tlenu przy użyciu katalizatorów Pd lub Pt nie był wcześniej opisany w literaturze. W związku z tym uzyskane wyniki mogą przyczynić się do lepszego poznania czynników odpowiedzialnych za aktywność katalizatorów w reakcji elektroredukcji tlenu.

3. Funkcjonalizacja filmów polimerowych jako narzędzie do otrzymywania nowoczesnych nanomateriałów o znacznym potencjale aplikacyjnym

Projekt badawczy "Sonata" NCN UMO-2011/01/D/ST5/04913 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Marta Kolasińska-Sojka)

Celem naukowym projektu jest funkcjonalizacja filmów polimerowych za pomocą wybranych nanoobjektów oraz zbadanie wpływu struktury i właściwości powierzchniowych zaprojektowanych nanokompozytów na ich potencjalne zastosowanie w dziedzinie nowoczesnych materiałów o złożonych funkcjach. Nanokompozyty są otrzymywane techniką sekwencyjnej adsorpcji z roztworów przeciwnie naładowanych polielektrolitów i/lub nanocząstek bądź liposomów. Jako nanocząstki używane są hydrofilowe nanocząstki złota, srebra, oraz hydrofobowe kropki kwantowe. Kropki kwantowe charakteryzują się szerszym pasmem absorpcyjnym i węższym pasmem emisji fluorescencji i wielokrotnie wyższą stabilnością niż tradycyjne barwniki fluorescencyjne. Ponieważ w postaci niezmodyfikowanej są toksyczne dla tkanek muszą być dostarczane we wnętrzu liposomów lub nanokapsulek tworzonych z biokompatybilnych materiałów. Ponadto są trwalsze w postaci hydrofobowej, co może mieć kluczowe znaczenie w przypadku ich zastosowania jako markerów fluorescencyjnych.

W tegorocznych pracach badawczych skupiono się na określeniu wpływu modyfikacji stałych powierzchni modelowych przy użyciu warstw/wielowarstw polielektrolitowych na proces otrzymywania zaadsorbowanej biwarstwy lipidowej. Metoda samoorganizacji *layer by layer* została wykorzystana do otrzymywania wielowarstwowych filmów polielektrolitowych. Do konstrukcji nanokompozytów użyto zarówno syntetycznych (PEI, PSS, PDADMAC), jak i naturalnych (PLL, PGA) polielektrolitów. Do preparatyki liposomów zastosowano metodę hydratacji cienkiego filmu lipidowego, a w celu ujednoczenia rozmiarów pęcherzyków wykorzystano ekstruzję przez membrany poliwęglanowe o ściśle określonych rozmiarach porów (100 nm). Badania przeprowadzono dla dwóch układów liposomowych o różnych składach lipidów. Zbadano rozmiary i potencjał zeta liposomów. Kolejnym niezwykle istotnym etapem pracy było monitorowanie kinetyki procesu adsorpcji liposomów *in situ* za pomocą mikrowagi kwarcowej z kontrolowaną dyssypacją (QCM-D). Zastosowanie tej techniki umożliwiło wyznaczenie masy zaadsorbowanej oraz określenie struktury form lipidowych (liposomów, biwarstw) tworzących się na powierzchniach zmodyfikowanych. Stwierdzono, że na powierzchniową fuzję liposomów wpływa zarówno rodzaj pęcherzyków lipidowych jak również rodzaj polielektrolitów użytych do modyfikacji stałego podłoża. Zaadsorbowaną biwarstwę lipidową otrzymano tylko dla ujemnie naładowanych liposomów osadzonych na sensorze złota pokrytym polietylenoiminą.

Kolejnym realizowanym zadaniem była modyfikacja stopnia hydrofobowości kropek kwantowych przy użyciu lipidów. Zastosowano strategię wbudowania kropek kwantowych w hydrofobowe części liposomów. Używano serie kropek kwantowych o rozmiarach od 1.6 nm do ok. 6 nm. Każdy rodzaj kropek kwantowych udało się wbudować w badane układy lipidowe co zostało udowodnione poprzez rejestrację, przy użyciu spektrofluorymetru, widm emisji dla liposomów z kropkami kwantowymi. Obserwowano charakterystyczne piki odpowiadające zastosowanym kropkom kwantowym. Oczywiście wykluczono fluorescencję dla czystych układów lipidowych.

Kolejnym etapem prac było zbadanie procesu osadzania tak zmodyfikowanych liposomów na stałych powierzchniach modelowych. Otrzymane wyniki potwierdzają adsorpcję liposomów zmodyfikowanych kropkami kwantowymi na wybranych filmach polielektrolitowych osadzonych na powierzchni kryształu kwarcowego z elektrodą złotą.

4. Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: modelowanie komputerowe

Projekt badawczy "sonata" NCN UMO-2011/03/D/ST4/01230 [2012-2015]

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

Celem badań było szczegółowe zbadanie dynamiki oraz termodynamiki przejść konformacyjnych (typu krzesło ${}^1C_4 \leftrightarrow$ krzesło 4C_1) w cząsteczkach wybranych cukrów, zbudowanych z sześciocłonowych pierścieni (heksopiranoz). Konformacja pierścienia w cząsteczkach węglowodanów heksopiranozowych jest jednym z centralnych zagadnień glikobiologicznych. Konformery pierścieniowe determinują biologiczną funkcję i aktywność węglowodanów a dynamiczna równowaga pomiędzy poszczególnymi konformerami reguluje m.in. makroskopowe właściwości hydrodynamiczne polocukrów. Z uwagi na ekstremalnie wysokie bariery energii swobodnej oddzielające stany odpowiadające poszczególnym konformerom, większość badań jest skupionych na szczegółowym opisie profili energii swobodnej, przy zaniechaniu opisu cech dynamicznych procesu deformacji pierścienia.

Niniejsze badania, oparte o zastosowanie metody *transition path sampling* (TPS) miały na celu m.in. uzupełnienie tego braku. Badania skupione były na cząsteczkach α -D- i β -D-glukopiranozy (odpowiednio, GlcA i GlcB), zanurzonych w środowisku wodnym i traktowanych jako układy modelowe. Wyniki pozwoliły na:

- i) zidentyfikowanie odrębnych minimów lokalnych energii swobodnej, odpowiadających stanom przejściowym dla zmiany konformacyjnej ${}^4C_1 \leftrightarrow$ 1C_4 ;
- ii) przypisanie charakterystyki czasowej do ww. zmiany oraz stanów przejściowych;
- iii) przeprowadzenie poszukiwań optymalnej współrzędnej reakcji ${}^4C_1 \leftrightarrow$ 1C_4 , opartych na procedurze Petersa-Trouta.

Dodatkowo, struktury odpowiadające stanowi przejściowemu reakcji the ${}^4C_1 \leftrightarrow$ 1C_4 (TS) zostały zidentyfikowane i poddane analizie. Wbrew oczekiwaniom, okazało się, że dynamika wody nie ma większego wpływu na prawdopodobieństwo ewolucji struktur będących TS dla GlcA do 4C_1 lub 1C_4 . Odmienne rezultaty otrzymane dla GlcB (tj. znaczny wpływ dynamiki wody na zachowanie TS oraz słaba stosowalność procedury Petersa-Trouta) przemawiają za nieco innymi mechanizmami rządzącymi deformacją pierścienia GlcA i GlcB, prawdopodobnie z większym wkładem 'dyfuzyjnego' błędzenia układu po krajobrazie energii swobodnej w przypadku GlcA.

Wyniki stanowią istotny wkład do zrozumienia mechanizmów zmian konformacyjnych w pierścieniach węglowodanów na poziomie molekularnym. Ponadto, zmodyfikowane algorytmy TPS mogą zostać użyte do badań przejść konformacyjnych innego typu w zbliżonych właściwościach układach.

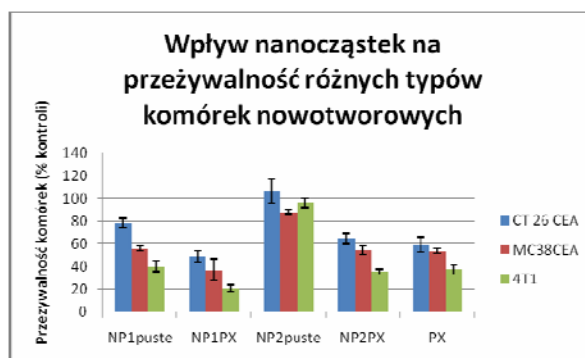
5. Wcelowane dostarczanie leków-synteza i funkcjonalizacja nanoosińników

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/03/D/ST5/05635 [2012-2017]
(kierownik projektu: dr Krzysztof Szczepanowicz)

Nanokapsułki mogą być stosowane w specyficznych systemach dostarczania leków, ponieważ mogą one mieć zdolność przenikania przez błonę komórkową, ponadto, mogą one być specyficznie sfunkcjonalizowane, co pozwoli na osiągnięcie tzw. „*intelligent targeting*”, czyli na uwalnianie leku w odpowiednim miejscu i czasie w organizmie, co zminimalizuje jedną z największych słabości stosowanych tradycyjnie preparatów leczniczych czyli czasoprzestrzenną nieselektywność oraz umożliwi wyeliminowanie poważnych skutków ubocznych stosowanych terapeutyków na skutek ich toksycznego działania w całym organizmie.

Celem niniejszego projektu jest opracowanie podstaw naukowych metod enkapsulacji terapeutyków w specyficznie sfunkcjonalizowanych nanoosińnikach, wykazujących zwiększone powinowactwo do ściśle określonych miejsc na przykład do receptorów występujących na powierzchni chorobowo zmienionych komórek. Postawiony cel badawczy zostanie osiągnięty w kilku podstawowych krokach. Pierwszym z nich będzie opracowanie metody enkapsulacji związków aktywnych różnymi metodami. Następnie otrzymane kapsułki zostaną sfunkcjonalizowane w celu osiągnięcia wcelowanego dostarczania leku, tzw. "inteligentnego dostarczania", czyli dostarczanie leku tylko do określonych miejsc, komórek lub narządów. Ostatnim krokiem będą testy biologiczne mające za zadanie zbadanie cytotoksyczności otrzymanych nośników oraz zweryfikowanie selektywnego działania przygotowanych kapsułek w modelu komórkowym. Prace prowadzone będą jednocześnie w dwóch ośrodkach posiadających odpowiednie doświadczenie oraz zaplecze sprzętowe niezbędne w tego typu badaniach: w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN oraz na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego.

W 2013 roku skupiliśmy się na preparatyce nanokapsułek zawierających hydrofobowy lek przeciwnowotworowy Paklitaxel oraz na zbadaniu aktywności cytotoksycznych/cytostatycznych wytworzonych preparatów. Nanokapsułki otrzymano metodą opracowaną w naszym laboratorium tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych. Otrzymano nośniki Paklitaxelu o średnim rozmiarze 100 nm. Analizę aktywności biologicznej przeprowadzono stosując różne linie komórek nowotworowych CT26-CEA, MC38-CEA oraz 4T1. Aktywność enkapsulowanych preparatów badano wykorzystując różne testy biochemiczne (MTT, LDH). Analiza *in vitro* wykazała wysoką aktywność nanokapsułek zawierających lek Paklitaxel porównywalną do aktywności wolnego leku. Rysunek 1 przedstawia porównanie wpływu nanokapsułek pustych (NP1 i NP2), zawierających Paklitaxel (NP1PX, NP2PX) oraz wolnego Paklitaxelu (PX) na przeżywalność badanych komórek nowotworowych. Uzyskane wyniki stanowią podstawę dla kontynuacji badań w celu zastosowania nanoosińników w terapiach antynowotworowych.



Rysunek 1. Wpływ nanocząstek na przeżywalność różnych typów komórek nowotworowych. Komórki CT 26 CEA, MC 38 CEA oraz 4T1

6. Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium denitrificans*

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2012/05/D/ST4/00277 [2013-2017]

(kierownik projektu: dr hab. Maciej Szaleniec)

Celem projektu jest przebadanie mechanizmu reakcji hydroksylacji pochodnych cholesterolu przez dehydrogenazę C25 sterolową. Enzym ten pochodzi z denitryfikującej bakterii *Sterolibacterium denitrificans* i należy do klasy enzymów molibdenowych, podobnych do dehydrogenazy etylobenzenowej. Hydroksylacji ulega tylko trzeciorzędowy atom węgla (C25) cholesterolu i jego pochodnych, a reakcja przebiega bez udziału tlenu cząsteczkowego, najprawdopodobniej z udziałem ligandu tlenowego (Mo=O) kofaktora molibdenowego.

Badania mechanizmu prowadzone są zarówno metodami teoretycznymi, jak i eksperymentalnymi. W ramach teoretycznego modelowania opracowano model homologiczny enzymu bazując na strukturze krystalograficznej dehydrogenazy etylobenzenowej, enzymu prototypowego dla tej podklasy białek. Struktura utlenionego (aktywnego katalitycznie) kofaktora molibdenowego została uzyskana z obliczeń QM:MM prowadzonych dla dehydrogenazy etylobenzenowej. Uzyskany model homologiczny poddano minimalizacji, a następnie dynamice molekularnej samego centrum aktywnego wypełnionego i pozbawionego cząsteczek wody.

Uzyskane modele posłużyły do zadokowania serii 20 związków, substratów, potencjalnych substratów oraz inhibitorów S25DH, co pozwoliło na przeanalizowanie istotnych interakcji w centrum aktywnym oraz weryfikacji zoptymalizowanego modelu homologicznego. Rozpoczęto również prace nad parametryzacją kofaktora molibdenowego w celu przeprowadzenia pełnej dynamiki molekularnej dla całego modelu podjednostki α .

W ramach prac eksperymentalnych opracowano tlenową metodę oczyszczania składającą się z trzech etapów chromatograficznych: dwóch etapów chromatografii jonowej na złożu DEAE-Sepharose, Q-Sepharose i jednego etapu chromatografii powinowactwa (złoże Reactive Red). Zastosowano 0.1 mM ferrocenian tetrafluoroboranu jako czynnik protekcyjny, co umożliwiło zachowanie aktywności enzymu w czasie oczyszczania. Uzyskany preparat enzymatyczny charakteryzował się ok. czterokrotnie większą aktywnością właściwą od preparatu uzyskiwanego w uprzednio opracowanej procedurze oczyszczania tlenowego.

W ramach badań nad zależnością struktury substratów, a ich aktywnością przebadano szereg nowych substratów takich jak protopanaxatriol, dipterocarpol, kwas cholowy oraz stigmasterol. Wstępne badania pokazały śladową aktywność z stigmasterolem.

W ramach badań kinetycznych prowadzono również optymalizację warunków spektrofotometrycznego testu kinetycznego. Podstawowym problemem badań kinetycznych S25DH jest bardzo niska rozpuszczalność substratów w wodzie, co utrudnia przebadanie zależności szybkości reakcji od stężenia substratu. Przebadano wpływ stężenia czynników zwiększających rozpuszczalność substratów (takich jak beta-cyklodekstryna, tert-butanol, saponiny, DDM, CHAPS i 2-metoksyetanol) opracowując 6 krotnie czulszy test aktywności w stosunku do metody znanej z literatury.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "OPUS"

1. Mechanizm zniszczeń obrazów panelowych z uwzględnieniem struktury przyrostów rocznych drewna i rzeczywistych fluktuacji klimatu

Projekt badawczy "Opus" NCN 2001/01/B/HS2/02586 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr hab. Łukasz Bratasz)

Do najpoważniejszych zagrożeń polichromii na drewnie należą niekontrolowane fluktuacje wilgotności względnej i temperatury powodujące naprężenia w wielowarstwowym układzie drewna, kleju, zaprawy i powłok malarskich, które prowadzą do uszkodzeń fizycznych poszczególnych materiałów. Projekt jest kolejnym krokiem w precyzyjnym ustaleniu dopuszczalnych fluktuacji parametrów powietrza, podejmującym szerokie badania nad zjawiskiem zmęczenia warstw polichromii na drewnie, tj. zniszczeń wynikających z wielokrotnego zachodzenia cykli odkształcenia materiału nawet poniżej granicy plastyczności.

Przeprowadzone w pierwszym etapie projektu badania procesów zmęczeniowych zaowocowały wyznaczeniem krzywych zmęczeniowych dla warstwy polichromii na drewnie, czyli zależności między odkształceniem prowadzącym do pierwszego pęknięcia warstwy, a liczbą cykli odkształcających to pęknięcie wywołujących. Badanie te wskazały, że dla bodźców rozciągających o amplitudach odkształceń względnych równych 0,2 i 0,4 stabilizacja uszkodzenia następuje odpowiednio dla 75 000 oraz 170 000 ilości cykli.

W obecnym etapie badań położono nacisk na określenie wpływu struktury przyrostów rocznych na powstawanie siatki pęknięć na powierzchni gruntu malarskiego oraz na ocenę wpływu kolejności cykli odkształceń o różnych amplitudach na szybkość rozwoju uszkodzeń.

W przypadku drewna lipowego, jednego z najczęściej stosowanych w malarstwie tablicowym, różnice w wilgotnościowym odkształceniu drewna wczesnego i późnego są mniejsze niż różnice średniej odpowiedzi różnych próbek wykonanych z tego drewna na takie same bodźce wilgotnościowe. Natomiast na granicy między drewnem wczesnym i późnym zarówno podczas zmian mechanicznych jak i wilgotnościowych powstają duże koncentracje odkształceń, które przenoszą się na warstwy dekoracyjne powodując ich pękanie.

Systematyczne badania zmęczeniowe wskazały, że kolejność cykli mechanicznych nie ma wpływu na szybkość powstawania pęknięć na powierzchni gruntu malarskiego, znaczenie natomiast ma wilgotność w jakiej przebywały próbki przed wykonaniem pomiarów. Wpływ ten zbadano poddając mechanicznym testom zmęczeniowym próbki gruntu na podłożu drewnianym kondycjonowane w różnej wilgotności względnej. Pierwsze wyniki wskazują że w wysokich wilgotnościach, ze względu na ciągliwość gruntu malarskiego, następuje obniżenie naprężeń w próbce co po powrocie do wilgotności 50% zmniejsza ryzyko pęknięcia warstwy malarskiej podczas jej rozciągania. Monitorowanie odkształceń próbek podanych cykлом wilgotnościowym o dużej amplitudzie potwierdziło dużą zmianę stanu naprężeń warstwy gruntu po przejściu cyklu wysokiej wilgotności.

Ilościowa ocena wpływu powyższych zjawisk na szybkość rozwoju uszkodzeń warstw malarskich będzie podstawą algorytmu symulującego zniszczenie powierzchni obiektów zabytkowych wywołane rzeczywistymi bodźcami klimatycznymi występującymi w środowiskach, w których obiekty te są przechowywane.

2. Opracowanie technologii wytwarzania stabilnej i łatwo biodegradowalnej piany ciekłej do zastosowań przemysłowych i biomedycznych

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/01/B/ST8/03717 [2011-2014]

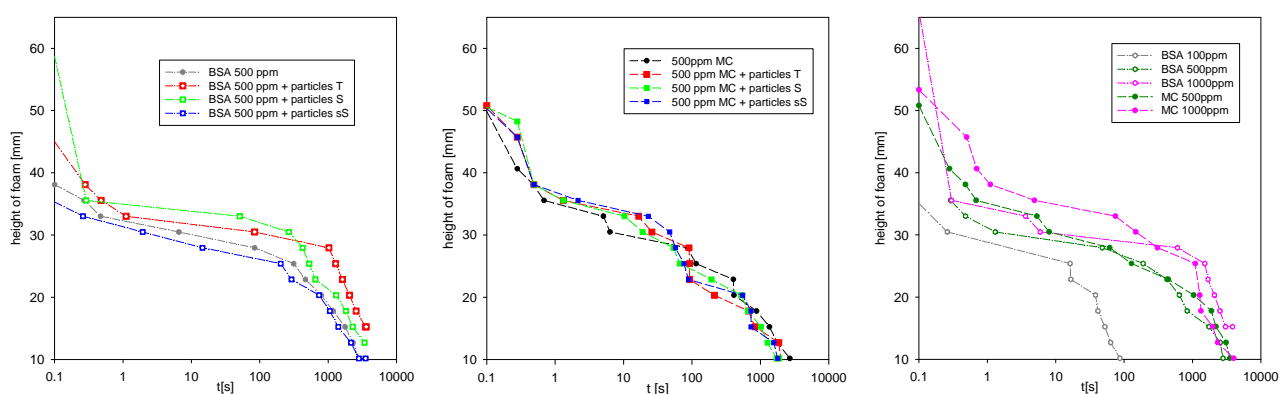
(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

Piany ciekła to bardzo skomplikowane układy dynamiczne o strukturze komórkowej, w których zdyspersgowane pęcherzyki gazowe są poprzedzielane cienkim filmem ciekłym. Głównym procesem wpływającym na stabilność pian jest wyciekanie cieczy zachodzące pod wpływem grawitacji oraz sił lepkościowych występujących pomiędzy sąsiadującymi pęcherzykami. W efekcie tego procesu, w przypadku braku substancji stabilizujących pianą zanika.

Projekt ma na celu opracowanie technologii wytwarzania bio-insprowanej, łatwo degradowalnej piany na bazie polisacharydów i/lub białek, stabilizowanej rozproszonymi mikro-, nano- lub koloidalnymi cząstkami. Cząstki jako składniki powinny blokować wyciekanie płynu z warstwy filmu zwiększając stabilność piany, sprężystość oraz granicę plastyczności. Takie biopiany jako łatwo ulegające rozkładowi mogą być alternatywą do obecnie używanych pian na bazie anionowych surfaktantów. Do tej pory pianki na bazie biopolimer zostały uznane jako szczególnie niestabilne.

Wykonano pomiary pianotwórczości i stabilności pianowej w kolumnie szklanej dla mieszanin badanych biopolimerów z różnymi, wybranymi cząstkami stałymi. W kolumnie badano automatycznie zmiany wysokości słupów piany i cieczy w czasie, bezpośrednio od momentu rozproszenia powietrza w roztworze aż do chwili zaniku fazy pianowej. Przyjmuj się, że początkowa wysokość frakcji pianowej charakteryzuje zdolności pianotwórcze badanego roztworu, czyli zdolność badanego układu do wytworzenia piany. Natomiast stabilność piany jest opisywana przez tempo zaniku piany.

Stwierdzono, że obecność cząstek wpływa na stabilność pian wytworzonych na bazie BSA znacznie więcej niż piany generowane z metylocelulozy. Cząstki o średnicy powyżej 100 nm, zwiększały znacznie trwałość i wysokość piany z BSA. Ponadto, otrzymane wyniki opisujące początkowe wysokości pian były w dobrej zgodności z danymi uzyskanymi na podstawie pomiarów zmian dynamicznego napięcia powierzchniowego: niższe wartości napięcia powierzchniowego pokrywały się z większymi wartościami wysokości słupa pianowego.



Rysunek 1. Stabilność pian wytwarzanych na bazie mieszanin biopolimerów (BSA i metyloceluloza MC) oraz wybranych cząstek stałych o znanych parametrah fizykochemicznych. (badane cząstki: T - TiO₂ P90 Degussa, particle size ca. 2000nm, S = SidiShield C25 SiO₂, particle size ca. 200nm, sS => it's Elkem NanoSilica 999 SiO₂, particle size ca. 100nm)

3. Wpływ gliceryny jako nietoksycznego i biodegradowalnego rozpuszczalnika na mechanizm utleniania fenolu

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/03/B/ST5/01576 [2012-2015]

(kierownik projektu: dr Katarzyna Pamin)

Wiele reakcji chemicznych jest prowadzonych w lotnych, niebezpiecznych i toksycznych dla organizmów żywych rozpuszczalnikach. Z powodu ich ujemnego wpływu na środowisko naturalne jest sprawą konieczną usuwanie ich z procesów chemicznych. Ograniczenie ich stosowania jest też wymuszane poprzez nacisk różnych międzynarodowych instytucji takich jak Protokół Montrealski. Idealny rozpuszczalnik powinien być nietoksyczny, biodegradowalny, nielotny, zdolny do rozpuszczania szerokiej gamy związków, niedrogi i nadający się do powtórnego użycia. Takie warunki spełnia gliceryna. Gliceryna jest otrzymywana w dużych ilościach jako produkt uboczny transestryfikacji trojglicerydów. Zastąpienie lotnych rozpuszczalników organicznych przez rozpuszczalnik przyjazny dla środowiska będzie miało duży wpływ na ograniczenie stosowania rozpuszczalników organicznych na skalę przemysłową.

Jak dotąd w Polsce, nie podjęto żadnych prób w celu zastosowania gliceryny lub jej pochodnych jako rozpuszczalników w reakcji utleniania fenoli wodą utlenioną w obecności kompleksów metali przejściowych oraz heteropoli związków jako katalizatorów. Utlenianie fenolu do hydrochinonu i katecholu jest ważną na skalę przemysłową reakcją i ponadto służy jako metoda przetwarzania zanieczyszczeń fenolowych w związki łatwe do usunięcia ze środowiska naturalnego. Kompleksy metali przejściowych takich jak metaloporfiryny, metalo-ftalocyjaniny, metalosaleny i heteropoli związki są znane jako wydajne katalizatory reakcji utleniania i dlatego zostaną użyte jako katalizatory reakcji utleniania fenoli wodą utlenioną.

Pierwszy etap badań polegał na syntezie rozpuszczalnych w wodzie kationowych metaloporfiryn MnTMPyP, FeTMPyP, CoTMPyP; MnTAP, FeTAP, CoTAP; anionowych metaloporfiryn MnTPPS, FeTPPS, CoTPPS; anionowych metalo-ftalocyjanin MnPcS, FePcS, CoPcS, NiPcS, CuPcS oraz anionowych metalosalenów MnSalenS, FeSalenS, CoSalenS. Drugą grupę zsyntezowanych związków stanowią sole kobaltu, manganu i żelaza kwasów fosforowolframowego i fosfomolibdenowego $H_{3-2x}M_xPX_{12}O_{40}$, gdzie X = Mo or W, x=1/2, 1, 1 1/2. Otrzymane preparaty zostały scharakteryzowane za pomocą spektroskopii FTIR i UV-Vis oraz cyklicznej woltometrii oraz zastosowane jako katalizatory reakcji utleniania fenolu wodą utlenioną w obecności gliceryny jako rozpuszczalnika.

Aktywność katalityczna kationowych metaloporfiryn została zbadana w reakcji utleniania fenolu w glicerynie. Dla obu grup metalokompleksów porfiryńowych został otrzymany następujący szereg aktywności: FeP > MnP > CoP, gdzie P=TMPyP lub TAP. Podobny szereg aktywności został uzyskany dla tych samych kompleksów w reakcji utleniania fenolu w acetonitrylu.

4. Monomery tlenków chromu(V), molibdenu (VI) i wolframu (VI) na powierzchni amorficznej krzemionki modyfikowanej glinem. Symulacje periodyczną metodą DFT

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/03/B/ST4/01223 [2012-2014]

(kierownik projektu: dr Robert Gryboś)

Podstawowym celem projektu jest określenie zależności aktywności od struktury dla tlenków chromu, molibdenu i wolframu osadzonych na tlenku krzemu oraz wyjaśnienie jak różnice pomiędzy tymi trzema pierwiastkami wpływają na obserwowaną aktywność ich tlenków. W projekcie wykorzystywany jest model amorficznej krzemionki stworzony przez dr. Frederika Tielensa z Uniwersytetu Piotra i Marii Curie w Paryżu, w oparciu o dynamikę molekularną *an-initio*. Pobocznym celem projektu jest weryfikacja periodycznego modelu amorficznej krzemionki dr Tielensa oraz stworzenie podwalin przyszłej współpracy.

Badania mają charakter teoretyczny i są prowadzone w oparciu o metodę periodyczną DFT (program VASP) z użyciem funkcjonałów PBE i PW91 oraz fal płaskich jako bazy funkcyjnej. Wyznaczono struktury monomerów typu MO_2 (gdzie $M=Cr, Mo, W$) zakotwiczonej pomiędzy dwoma centrami tlenowymi na powierzchni amorficznej krzemionki. W przyjętym modelu możliwych jest 27 różnych struktur dla każdego metalu. Określono też właściwości cząsteczki NH_3 zaadsorbowanej na kwasowych centrach Brønsteda (25 różnych struktur) oraz przebadano dwie modyfikacje powierzchni: (i) utworzenie wakancji krzemowej (27 możliwości) oraz (ii) podstawienie centrum krzemowego jonem glinu (27 możliwości). Planowane dalsze badania to m.in. testy reaktywności monomerów poprzez adsorpcję wodoru i desorpcję wody.

Wstępne opracowanie wyników sugeruje, że podstawowym czynnikiem od którego zależy reaktywność monomerów w reakcjach redoks jest położenie dodatkowych poziomów energetycznych (pochodzących od zakotwiczonego monomeru) w przerwie wzbronionej struktury pasmowej. Z kolei położenie tych pasm wykazuje korelację z kątem pomiędzy wiązaniami metal-powierzchnia.

Zgodnie z wymaganiami NCN prowadzone badania mają charakter podstawowy i nie prowadzą do bezpośrednich zastosowań w praktyce. Jednak dzięki systematycznemu opisowi układu o dużym znaczeniu w katalizie, uzyskane wyniki mogą stać się dobrą podstawą do bardziej praktycznych badań.

5. Właściwości fizykochemiczne i katalityczne heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment

Projekt badawczy "opus" NCN 2011/03/B/ST4/01216 [2012-2015]

(kierownik projektu: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP PAN)

Przedstawiony grant ma na celu opis właściwości fizykochemicznych i katalitycznych heteropolikwasów (HPA) modyfikowanych jonami miedzi (Cu-HPA), przy użyciu połączonych technik eksperymentalnych i obliczeń kwantowo-chemicznych. Celem projektu jest przebadanie układów Cu-HPA, w których jon(y) miedzi zajmują pozycje odpowiednio jonu centralnego, atomu addenda czy kationów kompensujących.

W okresie sprawozdawczym przedmiotem modelowania teoretycznego były heteropolikwasy, o strukturze Keggina $H_3PMe_{12}O_{40}$ (Me= Mo,W), z jonem miedzi w pozycji atomu centralnego (CuW), w pozycji atomu addenda (PCuW) i w pozycji kationu kompensującego. Obliczenia teoretyczne DFT wykonano z zastosowaniem funkcjonałów gradientowych PBE, B97-D i B3LYP. Wpływ rozpuszczalnika uwzględniony został poprzez uśredniony efekt solwatacji (model COSMO), bądź poprzez obliczenia specyficznego oddziaływania jonów Cu^{1+}/Cu^{2+} z cząsteczkami rozpuszczalnika (H_2O , CH_3CN , DMSO).

Wyniki obliczeń pokazują, że jon Cu^{2+} wprowadzony w strukturę anionu Keggina ma różny ładunek, w zależności od pozycji jaką zajmuje. Jako czterokoordynacyjny jon centralny ma ładunek znacznie wyższy od P, który tworzy jon centralny w układzie referencyjnym (PW). W pięciokoordynacyjnej pozycji addenda ładunek Cu^{2+} jest znacznie niższy niż ładunek pozostałych metali addenda (Mo/W). Miedź w pozycji jonu centralnego wpływa wyłącznie na zmianę ładunku, u położonych w najbliższym sąsiedztwie, niedostępnych dla reagentów, atomów tlenu tworzących wewnętrzny tetraedr. Jako jeden z metali addenda, Cu^{2+} wpływa na zmianę właściwości nukleofilowych bezpośrednio z nim skoordynowanych centrów tlenowych. Uzyskane z analizy Wiberga wartości rzędów wiązań, dla układów modyfikowanych miedzią, pokazują duże zróżnicowanie (w porównaniu do układu referencyjnego PW) wiązań w obrębie całego anionu Keggina. Zmiany dotyczą zarówno oddziaływań wewnętrzny tetraedr - reszta anionu, jak i wiązań metal tlen wewnątrz i pomiędzy tradami tworzącymi anion. Wprowadzenie Cu do anionu Keggina prowadzi do powstania układów z niesparowanym elektronem, który jak pokazuje analiza gęstości spinowej, zlokalizowany jest niemal w całości na wprowadzonym kationie Cu.

Wprowadzenie do układu HPA jonów Cu^{2+} skutkuje pojawieniem się w widmie gęstości stanów elektronowych, pomiędzy pasmem walencyjnym a pasmem przewodnictwa dodatkowych pików. Piki te zdominowane są przez orbitale $5d$ Cu. Charakter głównego pasma walencyjnego i pasma przewodnictwa w układach modyfikowanych pozostaje niemal identyczny jak charakter głównych pasm w układzie referencyjnym (PW). Pasma walencyjne składa się głównie z orbitali $2p$ tlenów mostkowych z niewielką domieszką metali addenda, natomiast pasmo przewodnictwa tworzą orbitale metali addenda (Mo/W) z niewielką domieszką orbitali tlenowych. Wyniki obliczeń dla modyfikowanych miedzią solwatowanych anionów Keggina wskazują na wpływ miedzi na energetykę orbitali granicznych. Energia orbitali HOMO zmienia się w szeregu: PW (-6.89) < PWCu (-5.61) < CuW (-4.62); energia orbitali LUMO zmienia się tylko nieznacznie (0.1-0.25 eV).

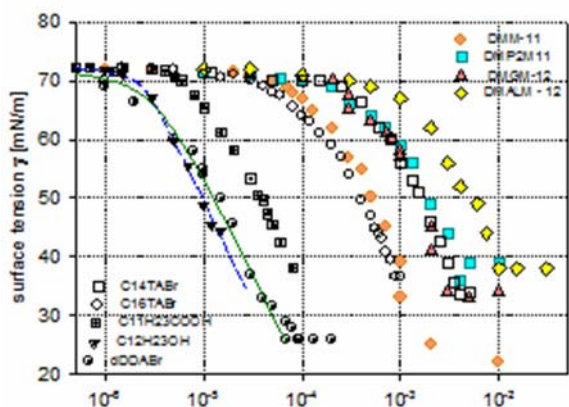
Oddziaływanie jonów Cu z cząsteczkami rozpuszczalnika zależy zarówno od ładunku jonu jak i rodzaju rozpuszczalnika. Jony Cu^{1+} tworzą z wodą kompleksy niskokoordynacyjne (koordynują 2-3 cząsteczki H_2O) podczas, gdy jony Cu^{2+} tworzą z wodą kompleksy sześciokoordynacyjne. Z acetonitrylem (CH_3CN) jony Cu^{1+} tworzą z rozpuszczalnikiem ugrupowania teraedryczne, a jony Cu^{2+} podobnie jak z wodą kompleksy oktaedryczne. Z cząsteczkami DMSO ($(CH_3)_2SO$) miedź tworzy ugrupowania tetraedryczne.

6. Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant - polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanoosników

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/03/B/ST4/01217 (2012-2016)

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Przedmiotem tegorocznego etapu projektu było badanie adsorpcji grupy surfaktantów - czwartorzędowych soli amoniowych o różnych strukturach: bromku N,N,N-trimetylo-2-(dodekanyloxy)ethanoamoniowego (DMM-11) i bromku N,N,N-trimetylo-2-(dodekanoyloxy)-1-metylo-ethanoamoniowego (DMP2M-11) jak również bromku dodecyloxykarbonylmetylo-N,N,N-trimetylo amoniowego (DMGM-12)) i bromku dodecyloxykarbonylo-1-etylo-N,N,N-trimetylo-ammoniowego (DMALM-12)), celem określenia wpływu obecności wiązania estrowego ROC(O)- lub karbonylowego R-CO-O- w molekułach na ich adsorpcję. Pomiary dynamicznego napięcia powierzchniowego wykonano metodą analizy kształtu kropli w szerokim zakresie stężeń badanych surfaktantów zawierających estrowe (DMM-11, DMP2M-11) i karbonylowe (DMGM-12, DMALM-12) wiązanie pomiędzy grupą polarną i hydrofobową. Rys.1 przedstawia porównanie izoterm napięcia powierzchniowego dla DMM-11, DMP2M-11, DMGM-12, DMALM-12 z izotermami: C16TABr, C14TABr, C11H23COOH i dDDABr. Porównanie aktywności powierzchniowej surfaktantów DMM-11 i DMGM12, posiadających tę samą masę molową lecz różną strukturę, pokazuje, że bardziej aktywny powierzchniowo jest DMM-11 zawierający dwie grupy -CH₂- i wiązanie estrowe pomiędzy polarną grupą amoniową i łańcuchem węglowodorowym -C₁₁H₂₃-. Izoterma napięcia powierzchniowego DMGM-12, z jedną grupą CH₂- i wiązaniem karbonylowym pomiędzy grupą amoniową i łańcuchem -C₁₂H₂₅- jest przesunięta o pół rzędu wielkości do wyższych stężeń w porównaniu z DMM-11. Adsorpcja DMM-11 i DMGM-12 odpowiada adsorpcji bromku cetylotrójmetylo-amoniowego (C16TABr) i tetradecylotrójmetyloamoniowego (C14TABr). Obecność dodatkowej grupy CH₃(izo) w pobliżu wiązania estrowego, lub karbonylowego w DMP2M-11 i DMALM-12 obniża aktywność powierzchniową obu surfaktantów o pół rzędu wielkości w porównaniu z DMM-11 i DMGM-12. Podczas adsorpcji obserwuje się zmiany napięcia powierzchniowego spowodowane procesem hydrolizy. Najsilniejsze obniżenie napięcia powierzchniowego wykazuje DMM-11. Początkowe i minimalne obniżenia napięcia powierzchniowego w roztworach obojętnych i kwaśnych DMM-11 są porównywalne i osiągają przy stężeniach bliskich cmc wartości 23 mN/m. Podobnie niską wartość napięcia powierzchniowego otrzymaliśmy dla dDDABr, posiadającego w cząsteczce jedną czwartorzędową grupę amoniową i dwa łańcuchy dodecyloxy. Hydroliza DMM-11 prowadzi do utworzenia kwasu dodecyloxy, który w zależności od pH środowiska dysocjuje do anionów dodekianu. Aniony te mogą tworzyć dimery z jonami kationowego surfaktantu obniżając napięcie powierzchniowe aż do 23 mN/m. Struktura otrzymanego kompleksu DMM⁺-dodekian⁻ jest podobna do struktury dDDABr. Można oczekiwać, że oddziaływanie tego typu surfaktantów z polielektrolitami będzie zależne od pH środowiska.



Rysunek 1. Eksperymentalne izotermy napięcia powierzchniowego: ● DMM-11, ▲ DMGM-12, ■ DMP2M-11 i ◆ DMALM-12, łącznie z izotermami dla ○ C16TABr[28], □ C14TABr[28] ● C11H23COOH i dDDABr

7. Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne i obliczeniowe

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/03/B/NZ1/04999 [2012-2015]

(kierownik projektu: dr hab. Tomasz Borowski prof IKiFP PAN)

Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury oraz mechanizmu reakcji katalitycznej dioksygenaz acireduktonu (ARD) – metaloenzymów szeroko rozpowszechnionych w przyrodzie i odpowiedzialnych za jeden z etapów recyklingu metioniny. Enzymy te wykazują unikalną zależność specyficzności reakcji katalitycznej oraz struktury od rodzaju metalu związanego w miejscu aktywnym. Realizowane prace obejmują biosyntezę i oczyszczanie badanych enzymów, badania kinetyczne reakcji katalitycznej, krystalizację enzymów oraz modelowanie molekularne.

Metodą spektroskopii mas potwierdzono masę oczyszczanych białek ARD. Ustalono warunki krystalizacji oraz otrzymano mikrokryształy ARD dla formy ludzkiej oraz bakteryjnej (*Bacillus anthracis*). Struktury obu form zostały rozwiązane metodą podstawienia molekularnego z wykorzystaniem znanej struktury ARD mysiego. W miejscu aktywnym ARD bakteryjnego związany jest jon Cd, w formie ludzkiej jon niezidentyfikowanego metalu (najprawdopodobniej żelaza) oraz ligand, wymodelowany w strukturze jako octan.

Uzyskane struktury będą podstawą do dalszych badań nad ARD, w tym dalszych prób krystalizacji oraz modelowania molekularnego.

8. Badania chemii powierzchni katalizatorów hybrydowych jako droga do wyjaśnienia ich właściwości katalitycznych w wysokociśnieniowej reakcji syntezy eteru dimetylowego z mieszaniny H₂/CO₂

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/05/B/ST4/00071 [2013-2016]

(kierownik projektu: dr hab R. Grabowski prof IKiFP PAN)

Celem projektu jest wyjaśnienie oddziaływań pomiędzy cząsteczkami substratów: CO₂, H₂ oraz tworzącymi się kompleksami przejściowymi na powierzchni badanych katalizatorów hybrydowych w procesie syntezy eteru dimetylowego (DME) z mieszaniny H₂/CO₂.

Prace w ramach projektu rozpoczęto w 2013 roku od realizacji pierwszego zadania badawczego, którym jest preparatyka katalizatorów bifunkcyjnych wraz z modyfikacją i charakterystyką ich składowej metalicznej (Cu/ZrO₂), a następnie kwasowej (montmorylonit K10). Katalizatory o składzie podstawowym 10moliCu/90moliZrO₂ zsyntetyzowano dwiema metodami preparatyki: współstrącania (przy użyciu różnych czynników strącających Na₂CO₃ i NaOH) i cytrynianową. Dodatkowo, w celu modyfikacji składowej metalicznej, wprowadzono (w ilości 3 %wag.) promotory metaliczne Ga, Mn, Cr i Ag. Celem wprowadzenia promotorów jest zmiana właściwości fizykochemicznych i teksturalnych powierzchni katalizatora a przez to zmiana jego własności katalitycznych, co ma wpływ na wydajność do DME. Znalezienie powiązań pomiędzy tymi zmianami pomoże wyjaśnić mechanizm wpływu dodatków na aktywność katalityczną samej składowej metalicznej.

Charakterystykę fizykochemiczną otrzymanych układów katalitycznych rozpoczęto od określenia wartości powierzchni właściwych metodą BET. Seria katalizatorów otrzymanych na drodze współstrącania Na₂CO₃ charakteryzuje się niskimi powierzchniami właściwymi (1.4-2.9 m²/g), natomiast seria cytrynianową posiada pożądane powierzchnie właściwe w przedziale 40-62 m²/g; pomiary BET dla preparatów z NaOH jako czynnikiem strącającym są kontynuowane.

Rozpoczęto także określanie właściwości redukująco – utleniających zsyntetyzowanych próbek za pomocą pomiarów H₂TPR. Dla preparatów otrzymanych metodą cytrynianową, w zależności od rodzaju wprowadzanego promotora metalicznego zmienia się przebieg profilu redukcji, w porównaniu z preparatem niedotowanym (T_{red} przesunięta w stronę niższych temperatur, mniejsze ilości fazy redukowalnej).

Zrealizowano zakup planowanej aparatury naukowo-badawczej, pozwalający na rozbudowę i przystosowanie istniejącej w IKiFP PAN celki do badań w podczerwieni cząstek zaadsorbowanych pod kątem badań zaplanowanych w tym projekcie.

9. Nanoklastery zeolitów jako podstawa nowych warstwowych materiałów porowatych dla procesów katalitycznych w fazie ciekłej

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST5/00771 [2013-2016]
(kierownik projektu: dr hab. Mirosław Derewiński prof. IKiFP PAN,
p.o. kierownika projektu: prof. Bogdan Sulikowski)

Celem badań podjętych w ramach projektu jest zaprojektowanie oraz opracowanie powtarzalnej procedury syntezy nowych preparatów warstwowych o multimodalnej strukturze porowatej. Podstawę nowych nanomateriałów stanowią prekursorzy zeolitów, tzw. *układy protozeolityczne*, którymi są powstające w początkowych etapach syntezy nanocząstki o wielkości kilku/kilkunastu nanometrów. Tego typu cząstki koloidalne, których wielkość odpowiada rozmiarom kilku/kilkunastu komórek elementarnych zeolitu, powstają w wyniku kondensacji reaktywnych ugrupowań krzemianowych/glinowokrzemianowych wokół cząsteczek organicznych szablonów strukturotwórczych obecnych w środowisku syntezy. Otrzymanie monodispersyjnych i stabilnych koloidalnych zawiesin cząstek protozeolitycznych, zawierających dodatkowo niezwiązane monomery oraz oligomery krzemianowe, jest podstawowym warunkiem syntezy nowych preparatów hierarchicznych i stanowi *pierwszy etap* prowadzonych badań.

Rozpoczęto prace nad zdefiniowaniem warunków koniecznych do powstania nanocząstek prekursorów zeolitu, poznaniem ich struktury, ustaleniem zależności ich wielkości i właściwości od składu chemicznego żelu (Si/Al) i warunków preparatyki, oraz stabilnością ich zawiesin. Podjęto badania nad przygotowaniem zawiesin koloidalnych nanocząstek (prekursorów) średnioporowatego zeolitu typu ZSM-5 (MFI), jednego z najważniejszych wysokokrzemowych sit molekularnych. Wybór tej właśnie struktury wynikał nie tylko z dużego znaczenia praktycznego zeolitu MFI, ale także z uwagi na jego wysoką stabilność termalną i hydrotermalną, możliwość syntezy w szerokim zakresie wartości modułu krzemowego oraz wysoką moc generowanych centrów kwasowych.

W okresie sprawozdawczym, stosując rozcieńczony żel oraz łagodne warunkach syntezy (temp. 20÷50°C), otrzymano monodispersyjne zawiesiny nanocząstek prekursorów zeolitu MFI (Al-ZSM-5) o różnym składzie chemicznym (Si/Al=12÷25), wielkości 5-6 nm, tj. składających się z kilkuset tetraedrów TO₄ (T=Si, Al), oraz zawierających w strukturze cząsteczki organicznego szablonu. Proces otrzymywania nanocząstek kontrolowano poprzez monitorowanie wzrostu ich wielkości metodami DLS oraz XRD. Pojawienie się strukturalnego uporządkowania krótkiego zasięgu, charakterystycznego dla struktur zeolitowych, potwierdzono metodą FTIR poprzez analizę pasm drgań strukturalnie wrażliwych wysuszonych preparatów. Stabilność otrzymanych zawiesin i ich odporność na agregację określono metoda DLS oraz poprzez pomiary potencjału zeta.

Prowadzona dalsza, szczegółowa charakterystyka powstających nanocząstek prekursorów zeolitu ma na celu nie tylko optymalizację procedury ich syntezy, ale również modelowanie właściwości otrzymywanych nanoobjektów.

10. Projektowanie, synteza i charakterystyka fizykochemiczna katalizatorów rutenowych oraz ich zastosowanie w reakcji uwodornienia prochiralnych ketonów

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST5/00770 [2013-2016]

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

Wstępne prace związane z realizacją projektu objęły zakup aparatury tj. suszarki próżniowej z pompą próżniową i oprzyrządowaniem do suszenia otrzymanych próbek nośników i katalizatorów. Ponadto zakupiono szereg ketonów i odczynników chemicznych, które zostaną użyte w reakcji uwodornienia.

11. Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST4/00518 [2013-2016]

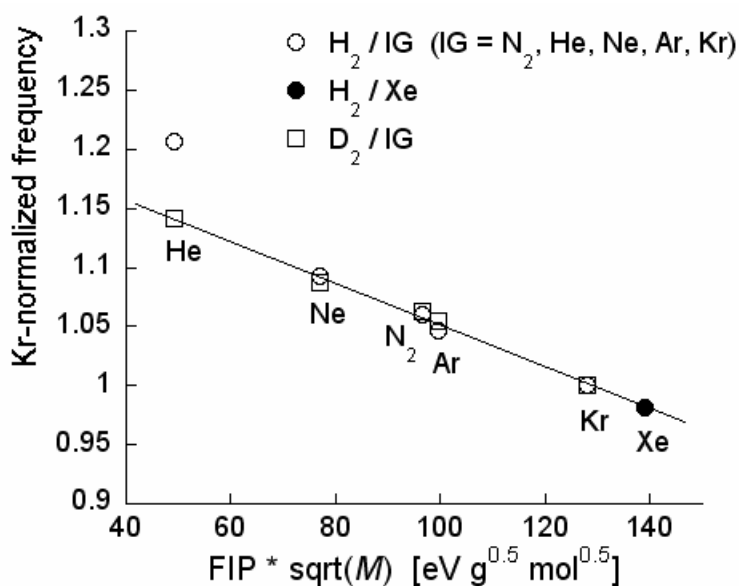
(kierownik projektu: dr Erwin Lalik)

Zjawisko oscylacji termokinetycznych towarzyszących sorpcji wodoru i deuteru w metalicznym palladzie zostało odkryte w pracowni mikrokalorymentrii IKFiP PAN w roku 2008. Warunkiem zachodzenia oscylacji jest wprowadzenie domieszki ok. 10 % obj. gazu obojętnego (N_2 lub gaz szlachetny) do przepływającego wodoru lub deuteru przed jego kontaktem z palladem. W poprzednich latach przebadano oscylacje sorpcji H_2 i D_2 z domieszkami N_2 oraz gazów szlachetnych z wyjątkiem Xe. Określona została empirycznie liniowa zależność znormalizowanej częstotliwości oscylacji od parametru będącego iloczynem pierwszego potencjału jonizacji gazu obojętnego i pierwiastka kwadratowego z jego masy atomowej. Jednym z zadań realizowanego obecnie projektu jest stwierdzenie, czy częstotliwość oscylacji z użyciem Xe jako domieszki stosuje się również do tej samej empirycznej zależności, poprzednio znalezionej dla N_2 , He, Ne, Ar i Kr.

Do eksperymentów wykorzystywany był układ złożony z mikrokalorymetru przepływowego do gazów firmy Microscal sprzężonego ze spektrometrem masowym. Jako próbki użyto proszku palladowego (0.3201 g) o średnicy ziarna poniżej $75 \mu m$. Cykle sorpcji/desorpcji przeprowadzane były w temperaturze $106^\circ C$, prędkość przepływu mieszaniny reakcyjnej wynosiła $3,2 \text{ cm}^3/\text{min}$, ułamek molowy H_2 0,94.

Rys. 1 pokazuje, że otrzymany nowy punkt dla układu H_2/Xe (zamknięty okrągły symbol) lokuje się na tej samej prostej, na której znajdują się również punkty dla pozostałych układów, to znaczy H_2/IG i D_2/IG (IG =inert gas). Wcześniej zauważonym wyjątkiem od tej empirycznej reguły jest układ H_2/He , a przyczyny takiego zachowania tego układu były obszernie dyskutowane przez autora w jednej z poprzednich publikacji.

Położenie nowo otrzymanego punktu H_2/Xe na tej samej prostej oznacza, że liniowa zależność znormalizowanej (względem Kr) częstotliwości oscylacji od iloczynu pierwszego potencjału jonizacji gazu obojętnego i pierwiastka kwadratowego z jego masy atomowej. (patrz $FIP \cdot \sqrt{M}$ na Rys. 1) została teraz potwierdzona także dla układu H_2/Xe . Przedstawione dane stanowią wyniki wstępne, trwają dalsze prace mające na celu uzyskanie danych dla układu D_2/Xe , jak również eksperymenty z wykorzystaniem próbek Pd o innej morfologii i uziarnieniu.



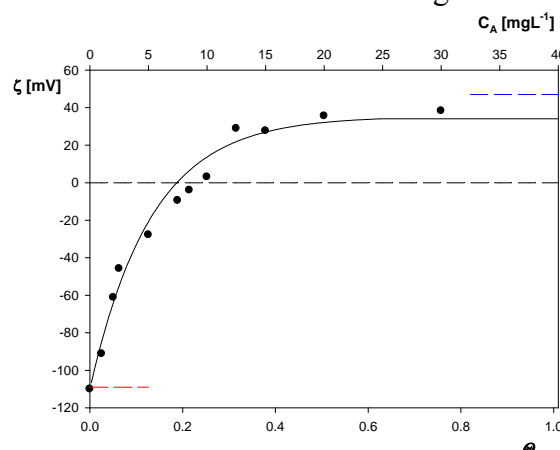
Rysunek 1. Empiryczna zależność średniej znormalizowanej (Kr) częstotliwości oscylacji termokinetycznych sorpcji H_2 i D_2 w metalicznym Pd od iloczynu pierwszego potencjału jonizacji gazu obojętnego (FIP) i jego pierwiastka kwadratowego masy atomowej (M).

12. Określenie mechanizmów adsorpcji wybranych białek anizotropowych w kontrolowanych warunkach transportu

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST4/00559 [2013-2016]
(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Celem badań było określenie mechanizmów adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych. W związku z tym przeprowadzono pomiary dla układu modelowego złożonego z dodatnio naładowanych nanocząstek lateksu amidinowego (średni rozmiar cząstek 98 nm, oznaczonego jako A100) oraz ujemnie naładowanego lateksu polistyrenowego (średni rozmiar cząstek 820 nm, oznaczonego jako L800). W celu ilościowego określenia pokrycia nanocząstek zastosowano metodę obrazowania techniką SEM, a także metodę mikro-elektroforetyczną i metodę ubytku stężenia oparta na obrazowaniu AFM.

Określono w sposób systematyczny wpływ siły jonowej zmienianej w zakresie od 10^{-4} do 10^{-2} M. Ilość zaadsorbowanych cząstek lateksu A100 wyznaczano z mikrofotografii uzyskanych techniką SEM, stosując specjalistyczny program analizy obrazu. Wyniki te były wykorzystane do kalibracji pomiarów przeprowadzonych przy pomocy pośredniej metody mikro-elektroforetycznej, umożliwiającej wyznaczenie ruchliwości elektroforetyczną cząstek lateksu L800 pokrytego cząstkami lateksu A100. Jak można zauważyć na Rys. 1 pomiary te pozostają w ilościowej zgodności z wynikami teoretycznymi obliczonymi przy użyciu modelu elektrokinetycznego 3D, który został uprzednio sformułowany dla płaskich powierzchni międzyfazowych (linia ciągła na Rys. 1). Podobne zależności zaobserwowano również dla innych sił jonowych. Wyniki te potwierdzają, że ten model elektrokinetyczny może być również stosowany dla zakrzywionych powierzchni międzyfazowych, np. cząstek koloidalnych podlegających elektroforezie. Ma to istotne znaczenie poznawcze wskazując, że wyniki uzyskane w dla modelowych powierzchni płaskich (często stosowanych np. w metodzie potencjału przepływu) mogą być wykorzystane do przewidywania mechanizmów adsorpcji nanocząstek i białek na powierzchniach nośników koloidalnych. Tym samym wyniki te mają również znaczenie aplikacyjne gdyż procesy adsorpcji białek na powierzchniach nośników koloidalnych są szeroko stosowane w warunkach praktycznych (testy immunologiczne) ze względu na znacznie bardziej efektywną kinetykę, w porównaniu z powierzchniami płaskimi. Brak jest natomiast efektywnej metody analitycznej umożliwiającej szybkie określenie w warunkach *in situ* ilości zaadsorbowanego białka.



Rysunek 1. Zależność potencjału zeta cząstek lateksu L800, □ od pokrycia cząstkami lateksu A100 θ , wyznaczona przy pomocy metody mikro-elektroforetycznej dla siły jonowej 10^{-2} M. Punkty przedstawiają wyniki doświadczalne, a linia ciągła wyniki teoretyczne obliczone przy pomocy modelu elektrokinetycznego 3D.

13. Struktura i właściwości warstw białkowych: od biomolekuły do funkcjonalnej warstwy (badania eksperymentalne i symulacyjne)

Projekt badawczy "Opus" NCN ST5/ 00767 [2013-2016]
(kierownik projektu: dr hab. Barbara Jachimska)

Adsorpcję surowicy albuminy bydlęcej (BSA) na powierzchni SiO_2 przy różnych wartościach pH badano stosując kilka metod: QCM-D, MP-SPR oraz AFM. Pomiary te pozwoliły na ustalenie zarówno kinetyki adsorpcji jak i maksymalnego pokrycie BSA w funkcji pH. Maksymalne pokrycie BSA uzyskano w zakresie pH od 4.5 do 5.4, czyli w pobliżu izoelektrycznego punktu tego białka. Przy $\text{pH} > 5.4$ i < 4.5 , masa zaadsorbowana na powierzchni zmniejszyła się monotonicznie. Obrazy AFM wykazano zmian w konformacji BSA. Pomiary pozwoliły wyróżnić kilka różnych stanów konformacji cząsteczki BSA. Konformacje te zostały potwierdzone poprzez badania lepkości dynamicznej roztworów. Najbardziej trwała, zwarta forma N występuje w zakresie pH 4.0-9.0 i charakteryzuje się efektywną długością $L_{\text{ef}}=8.3$ nm; wydłużone konformacje dominują przy pH 4.0 ($L_{\text{ef}}=18.1$ nm, forma E) oraz przy pH=3.0 ($L_{\text{ef}}=26.7$ nm, forma F).

Dodatkowo zaadsorbowane warstwy BSA na powierzchni SiO_2 charakteryzowano za pomocą pomiarów kąta zwilżania. Porównania wyników z kilku bezznacznikowych metod bezpośrednich takich jak QCM-D, MP-SPR AFM oraz metod pośrednich (pomiar kąta zwilżania) pozwoliło na szersze zrozumienie mechanizmu tworzenia warstw BSA w funkcji pH. Uzyskane wyniki potwierdzają istotną rolę wysoce anizotropowego rozkładu ładunku na powierzchni cząsteczki BSA na proces adsorpcji tego białka.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "PRELUDIUM"

1. Modelowanie aktywności katalitycznej nanostruktur biologicznych na przykładzie wybranych dioksygenaz zależnych od żelaza

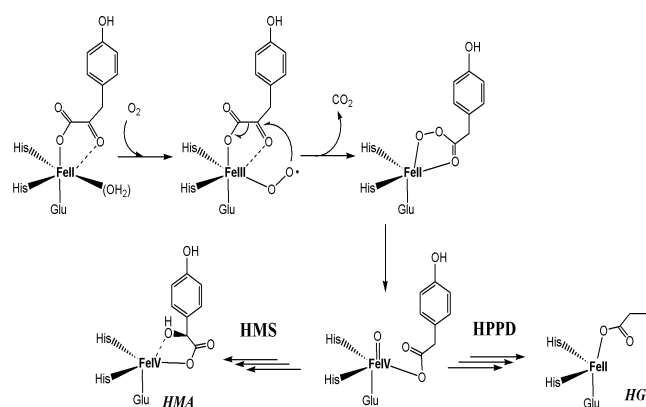
Projekt badawczy "Preludium" NCN 2011/01/N/ST4/02330 [2011-2013]

(doktorant: mgr (dr) Anna Wójcik, promotor: dr hab. Tomasz Borowski, prof. IKiFP PAN)

Niniejszy projekt poświęcony był poznaniu i analizie mechanizmów reakcji katalizowanych przez niehemowe dioksygenazy wiążące żelazo. Jako reprezentantów wybrano dwa blisko spokrewnione enzymy zaliczane do grupy dioksygenaz zależnych od α -keto kwasów: dioksygenazę 4-hydroksyfenylopirogronianu (HPPD) i syntazę hydroksymigdałanu (HMS). Oba białka są niezwykle interesujące, ponieważ wykorzystując te same substraty: tlen cząsteczkowy i 4-hydroksyfenylopirogronian katalizują reakcje, których początkowe etapy przebiegają prawdopodobnie w identyczny sposób prowadząc do różnych produktów: odpowiednio kwasu homogentyzynowego (HG) w przypadku HPPD i kwasu hydroksymigdałowego (HMA) powstającego w reakcji HMS (Rys. 1). Ze względu na fakt, iż oba enzymy charakteryzują się zblizoną strukturą trzeciorzędową, wykorzystują te same substraty i katalizują reakcje o podobnym przebiegu, interesująca jest również odpowiedź na pytanie: jakie czynniki decydują o ich specyficzności? Badania nad HMS i HPPD są znaczące pod względem farmaceutycznym, gdyż HMS jest wykorzystywany w produkcji antybiotyków makrocyklicznych, takich jak wankomycyna, natomiast HPPD uczestniczy w katabolizmie tyrozyny. Zaburzenia w funkcjonowaniu HPPD prowadzą do chorób genetycznych (tyrozinemii), które leczone są przez podanie inhibitorów HPPD. Inhibitory HPPD używane są również jako herbicydy, gdyż enzym ten uczestniczy w biosyntezie liofilowych kofaktorów, niezbędnych w procesie fotosyntezy.

Do zrealizowania wyznaczonych celów wykorzystano metody chemii teoretycznej obejmujące obliczenia kwantowo-mechaniczne (QM) oparte o Teorię Funkcjonału Gęstości (DFT), symulacje dynamiki molekularnej (MD) i obliczenia łączące metody mechaniki molekularnej (MM) i QM (QM/MM). Badania rozpoczęto od symulacji MD, które miały na celu wymodelowanie struktur HMS i HPPD w kompleksie z ich ostatnim wspólnym produktem pośrednim: hydroksyfenylooctanem (HPA, Rys.1.), na podstawie których zbudowane zostały modele QM i QM/MM. Modele MD skonstruowano w oparciu o struktury krystaliczne HMS i HPPD zdeponowane w bazie PDB (2r5v i 1CJX odpowiednio). Obliczenia QM przeprowadzono dla różnej wielkości modeli HMS i HPPD. Dodatkowo dla HPPD przeprowadzono badania metodą QM/MM w celu wyjaśnienia zaobserwowanego doświadczalnie odwrotnego drugorzędowego kinetycznego efektu izotopowego.

Jednym z najważniejszych osiągnięć wynikających z realizacji niniejszego projektu było pokazanie roli Ser201, zaangażowanej w wiązanie wodorowe z grupą hydroksylową substratu,



która przyjmując różne orientacje w centrach aktywnych HMS i HPPD, powoduje różne jego ustawienia względem reaktywnego układu Fe(IV)=O, tym samym determinując dalszy przebieg reakcji HMS i HPPD. Dodatkowo, przeprowadzono obliczenia QM/MM, mające na celu wglębie się w mechanizm katalizowany przez HPPD, które umożliwiły zaproponowanie mechanizmu reakcji katalizowanej przez ten enzym pozostający w zgodzie z wynikami eksperymentalnymi.

Rysunek 1. Reakcje katalizowane przez HMS i HPPD

2. Wpływ stopnia utlenienia metali nieszlachetnych w układach Au-Me-O/TiO₂ na oddziaływanie między nanocząstkami złota a nośnikiem.

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2011/03/N/ST5/04313 [2012-2013]

(doktorant: mgr inż. Jan Mizera, promotor: dr hab. Ryszard Grabowski prof IKiFP PAN)

Od czasu odkrycia aktywności katalitycznej nanocząstek złota w wielu reakcjach, takich jak utlenianie, uwodornienie i odwodornienie, katalizatory te udało się zastosować komercyjnie tylko w nielicznych przypadkach. Główny problem, jaki dotyka w/w układy katalityczne to ich względnie niska stabilność w czasie pracy, spowodowana spadkiem stopnia utlenienia złota, akumulacji węglanów i mrówczanów na centrach aktywnych powierzchni złota. Droga prowadząca do uzyskania stabilnego katalizatora prowadziłaby przez zmianę oddziaływania między nanocząstką złota a nośnikiem, tak by katalizator stał się odporny na opisane powyżej zjawiska. Koncepcją projektu jest zatem zmodyfikowanie aktywnego katalizatora (Au/TiO₂) tlenkami metali mających różne zdolności mieszania się ze złotem i z TiO₂ (Fe, Ni, Cu, Ag) tak aby wyznaczyć ich wpływ na nanocząstki złota oraz poszerzyć perspektywę postrzegania zjawisk zachodzących na powierzchni tych katalizatorów.

Wykonane dotychczas badania na temat katalizatorów Au-Me-O/TiO₂ uzupełniono o badanie składu pierwiastkowego preparatów metodą XRF, analizę krzywych osiągnięcia stanu stacjonarnego w celu określenia zjawisk zachodzących na powierzchni katalizatora a także uzupełniono badania H₂TPR o pomiary dla katalizatorów współosadzanych.

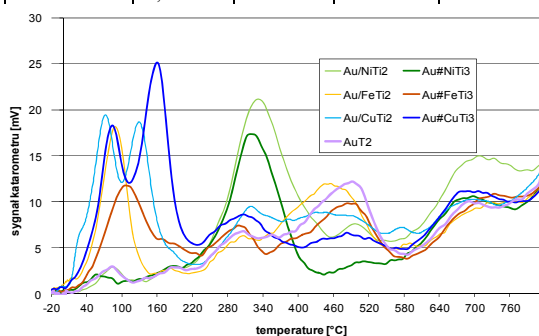
Wyniki XRF (Tabela 1) pokazały, że katalizatory mają zawartości poszczególnych składników bliskie nominalnym, przy czym zawartość złota w katalizatorach współosadzanych jest o około 10% wyższa niż w sekwencyjnie osadzanych.

Analiza przebiegu krzywych osiągnięcia stanu stacjonarnego, pokazała, że w trakcie osiągnięcia stanu stacjonarnego zachodzi kilka zjawisk. Najdłużej trwające zjawisko (np. aglomeracja najmniejszych cząstek), jest wspólne dla wszystkich domieszkowanych preparatów i powoduje spadek aktywności. Z kolei zjawiska, które zachodzą szybciej, mają różny efekt w zależności czy metal ma niższy potencjał redoks (Fe i Ni) czy też wyższy (Cu).

W celu zbadania redukowalności katalizatorów wykonano eksperymenty TPR katalizatorów współosadzanych, które zestawiono na Rys. 1 z katalizatorami sekwencyjnymi. Wykres pokazuje,

Tabela 1 Zawartości nominalne {} oraz rzeczywiste składników poszczególnych katalizatorów

Promotor	Sekwencyjne		Współstrącane	
	Au	M	Au	M
---	{1} 0,81	-	{1} 1,15	-
Ni	{1} 0,82	{0,3} 0,27	{1} 1,11	{0,3} 0,26
Fe	{1} 1,01	{0,28} 0,24	{1} 1,12	{0,28} 0,24
Cu	{1} 1,08	{0,32} 0,34	{1} 1,13	{0,32} 0,35



Rys. 1 Krzywe TPR katalizatorów Au-MO_x/TiO₂

że porównując katalizatory domieszkowane tymi samymi metalami, można zauważyć, że położenie pików charakterystycznych jest dość podobne a zmienia się jedynie ich intensywność. Scałkowanie krzywych pokazało, że w przypadku katalizatorów domieszkowanych Fe i Cu ilość skonsumowanego wodoru jest taka sama, natomiast w przypadku katalizatorów domieszkowanych Ni ilość skonsumowanego wodoru jest znacznie niższa dla katalizatora współosadzanego.

Najważniejszym osiągnięciem badań jest opisanie zależności między właściwościami fizykochemicznymi (redukowalność, zawartość domieszek,) a aktywnością w reakcji utleniania CO katalizatorów traktowanych w różnych atmosferach.

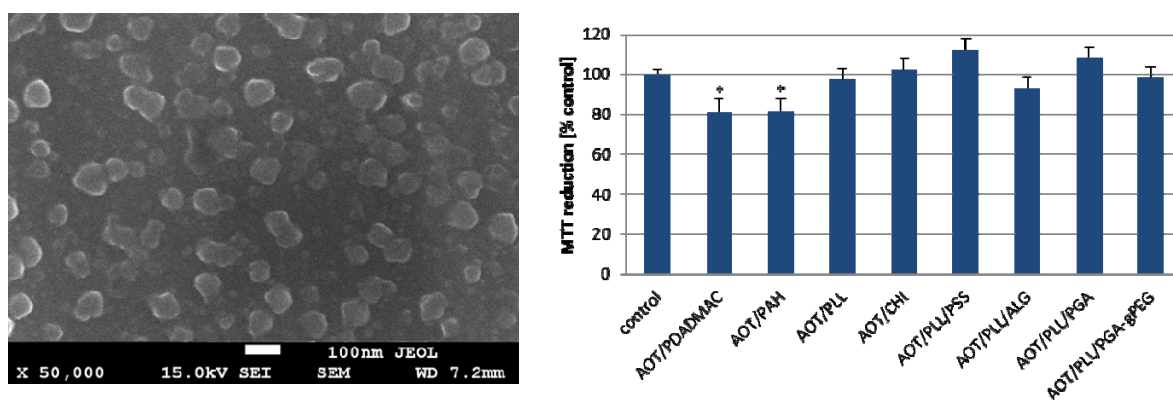
Wskazówki, jakie dostarczyły badania, umożliwią dokładniejsze określenie wpływu metali domieszkowych na aktywność oraz możliwości katalityczne układu Au/TiO₂.

3. Synteza biogodnych nanonośników dla wybranych substancji neuroprotektcyjnych

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2011/03/N/ST5/04808 [2012-2014]
(doktorant: mgr inż. Marek Piotrowski, promotor: prof. Piotr Warszyński)

Celem projektu jest synteza i charakterystyka biokompatybilnych nanonośników dla hydrofobowych leków neuroprotektcyjnych oraz zbadanie ich toksyczności oraz neuroochronnego działania na modelowych komórkach nerwowych.

Nanonośniki wytworzono za pomocą techniki layer-by-layer (LbL), poprzez adsorpcję polielektrolitów (np. PLL - bromowodoru poli(L-lizyny), PGA - soli sodowej poli(kwasu L-glutaminowego), chitozanu, alginianu sodowego) na rdzeniach emulsyjnych (faza hydrofobowa to np. IPM - mirystynian izopropylu, chloroform). Nanoemulsyjne rdzenie stabilizowane były za pomocą kompleksów polielektrolitów i surfaktantów (np. AOT - dokuzynian sodu). Rozkład wielkości oraz potencjał zeta nanonośników określono przy użyciu technik dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz laserowego pomiaru prędkości cząstek na podstawie zjawiska Dopplera (LDE). Średni rozmiar nanokapsulek wynosił od ~80 nm do ~100 nm a wartości bezwzględne potencjału zeta przekraczały 30mV. Dodatkowo nanopreparaty były wizualizowane za pomocą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM) (Rys. 1a). Nanonośniki były także modyfikowane powierzchniowo w celu uzyskania maksymalnej biogodności poprzez zastosowanie kopolimerów polielektrolit-glikol polietylenowy. Cytotoksyczność nanokapsulek zbadano na linii komórkowej ludzkiego nerwiaka płodowego SH-SY5Y, wykorzystując w tym celu biochemiczne testy MTT i LDH. Otrzymane wyniki pokazały, że nanokapsułki pokryte większością z wybranych polielektrolitów są nietoksyczne dla komórek SH-SY5Y (Rys. 1b).



Rysunek 1 a) Zdjęcie SEM nanokapsulek AOT(PLL/PGA)₁; b) Redukcja MTT w hodowlach komórek SH-SY5Y inkubowanych z rdzeniami nanokapsulek stabilizowanymi kompleksami AOT i różnych polielektrolitów.

Wewnątrz rdzenia nanokapsulek zamknięte zostały wybrane substancje neuroochronne - inhibitory wewnątrzkomórkowych kaskad reakcji biochemicznych prowadzących do śmierci komórek nerwowych (np. inhibitory kalpain: MDL 28170, UDA - kwas undecylenowy). Badania dotyczące efektywności nanonośników substancji aktywnych były prowadzone na modelowych układach uszkodzeń komórek SH-SY5Y z wykorzystaniem nadtlenku wodoru jako neurotoksyny. Stopień uszkodzeń i neuroprotekcji był oceniany przy pomocy testów biochemicznych i morfologicznych (np. MTT, LDH). Uzyskane wyniki zostały poddane analizie wariancji (ANOVA) i wykazały statystycznie istotną aktywność neuroprotektyjną enkapsulowanego MDL. Otrzymane wyniki wskazują na możliwą przydatność nanokapsulek jako nośników substancji neuroochronnych.

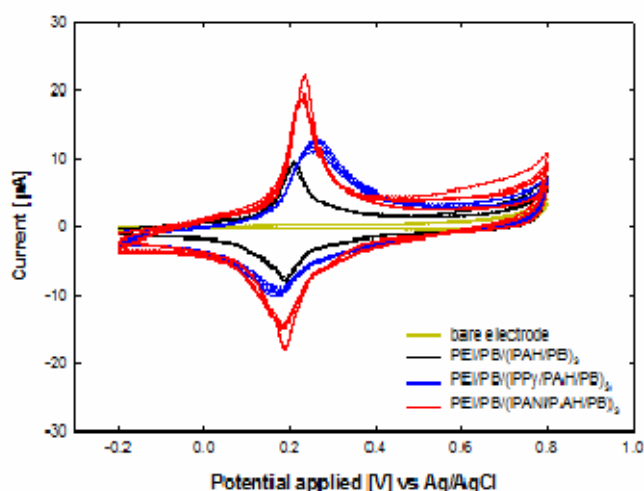
4. Udoskonalenie metody detekcji nadtlenu wodoru po przez modyfikację nanocząstek błękitu pruskiego polimerami przewodzącymi oraz zredukowanym tlenkiem grafenu

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2012/07/N/ST4/00350 [2013-2015]

(doktorant: mgr Anna Pajor-Świerzy, promotor: prof. Piotr Warszyński)

Skuteczne monitorowanie stężenia nadtlenu wodoru (H_2O_2) jest bardzo ważnym w wielu dziedzinach, m.in. w ochronie środowiska, różnych gałęziach przemysłu oraz w medycynie. W związku z tym głównym celem projektu jest stworzenie podstaw naukowych dla rozwinięcia prostej i uniwersalnej elektrochemicznej metody detekcji H_2O_2 . Metoda ta opiera się na zdolności nanocząstek błękitu pruskiego (PBN) do elektrokatalizy procesu utleniania i redukcji nadtlenu wodoru. Konstrukcja sensora nadtlenu wodoru polegać będzie na wytworzeniu wielowarstwowych struktur polielektrolitowych z wbudowanymi elektroaktywnymi nanocząsteczkami błękitu pruskiego (PBN).

Nanocząstki błękitu pruskiego o rozmiarze 10nm oraz potencjale zeta -50mV otrzymano w wyniku reakcji $FeCl_3$ z $K_4[Fe(CN)_6]$ w 10^{-2} M HCl. Za pomocą metody layer-by-layer (LbL) wytworzono wielowarstwowe filmy złożone z polielektrolitów i nanocząstek błękitu pruskiego. Metoda ta polega na sekwencyjnej adsorpcji, dodatnio lub ujemnie naładowanych nanoobjektów na skutek oddziaływań elektrostatycznych. Najważniejszą zaletą tej techniki jest możliwość uzyskania filmów o kontrolowanej grubości. W celu poprawy właściwości elektroaktywnych warstw polielektrolitowych z wbudowanymi PNB modyfikowano je poprzez dodatkowe wprowadzenie polimerów przewodzących: PEDOT:PSS, polipirołu lub polianiliny. Proces tworzenia wielowarstwowych filmów monitorowano przy użyciu mikrowagi kwarcowej (QCM), a ich właściwości elektroaktywne określano metodą woltamperometrii cyklicznej. Rys. 1 prezentuje porównanie przebiegu woltamogramów dla elektrod pokrytych wielowarstwowymi filmami PE/PBN modyfikowanych polimerami przewodzącymi polipyrolem (PPy) lub polianiliną (PANi). Wskazuje ono na zwiększenie prądów redox błękitu pruskiego w obecności polimerów przewodzących.



Rysunek 1. Porównanie woltamperogramów dla elektrod pokrytych filmami PE/PBN modyfikowanych polimerami przewodzącymi, polipyrolem lub polianiliną.

Za pomocą woltamperometrii cyklicznej wykazano, że inkorporacja PANi w strukturę filmu zwiększa o co najmniej 40% czułość elektrod dla elektrochemicznej detekcji nadtlenu wodoru, co świadczy o przydatności filmów zawierających nanocząstki błękitu pruskiego i polimery przewodzące jako warstw sensorowych w monitorowaniu stężenia H_2O_2 .

5. Wielowarstwowe filmy polimerowe zawierające nanocząstki oraz grafen jako funkcjonalne powłoki i membrany

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2012/07/N/ST5/00173 [2013-2016]

(doktorant: mgr Tomasz Kruk, promotor: prof. Piotr Warszyński)

Celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych metody funkcjonalizacji cienkich filmów polimerowych wytwarzanych metodą „warstwa po warstwie” (Layer by Layer) w celu otrzymania powłok o określonych właściwościach. Funkcjonalizacja filmów polimerowych jest prowadzona poprzez inkorporacje w ich strukturę nano-objektów: nanocząstek metalicznych, tlenkowych, tlenku grafenu lub jego zredukowanej formy. Procedura ta pozwala na otrzymanie ultracienkich struktur wielowarstwowych o określonej funkcjonalności (np. antybakteryjność, przewodność, antyadhezyjność) mogących mieć szerokie znaczenie aplikacyjne w wielu dziedzinach nauki np. medycynie, elektronice czy optyce.

W celu uformowania wielowarstwowych filmów polimerowych o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych wykonano syntezy nanocząstek wybranych metali/tlenków metali Ag, Cu/CuO, a następnie określono ich aktywność mikrobiologiczną. Przeprowadzono syntezy nanocząstek w micelarnych roztworach surfaktantów (SDS, CTABr, Tween80) oraz w obecności polimerów stabilizujących np. PDADMAC, PVP, PVA. Reakcje były oparte na redukcji jonów metali różnymi środkami redukującymi (hydrazyna, borowoderek sodu, formalina, UV). Otrzymane nanocząstki zostały scharakteryzowane pod względem ich właściwości fizykochemicznych (wielkość, potencjał zeta, stabilność, skład). Następnie nanocząstki zostały wbudowywane w cienkie filmy polielektrolitowe. Filmy te były formowane metodą warstwa po warstwie (LbL) i charakteryzowane różnymi metodami QCM, Elipsometria, UV-Vis oraz za pomocą mikroskopii SEM. Badania aktywności mikrobiologicznej otrzymanych suspensji nanocząstek jak i tworzonych filmów były wykonywane we współpracy z zewnętrznym laboratorium (Warszawski Uniwersytet Medyczny, Politechnika Łódzka). W tabeli zestawiono otrzymane wyniki aktywności mikrobiologicznej dla warstw z nanocząstkami srebra. Widoczne jest znaczne obniżenie adhezji w stosunku do próbki referencyjnej (PEI/PSS)₅.

Tabela 1. Adhezja bakterii – metoda luminometryczna.

Carrier	E. Coli ATCC 10536 Peptone water diluted [RLU]	A. hydrophila LOCK0968 Peptone water diluted [RLU]	A. lannensis FMW1 Fruit-drink with sacharose [RLU]
(PEI/PSS) ₅	25 300 ± 8 300	4 700 ± 2 505	4 800 ± 2 454
(PEI/Ag) ₁	4000 ± 2 300	1 200 ± 1 000	1 000 ± 550
(PEI/Ag) ₂	2 500 ± 1 100	1 000 ± 550	300 ± 78
(PEI/Ag) ₃	1 600 ± 460	830 ± 67	33 ± 21
(PEI/Ag) ₄	1 200 ± 340	340 ± 130	34 ± 11
(PEI/Ag) ₅	690 ± 78	180 ± 58	28 ± 11
(PEI/Ag) ₅ *po 1roku	230 ± 56	1 300 ± 670	21 ± 14

W dalszym etapie projektu aktywność filmów będzie badana względem laboratoryjnych szczepów bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych, jak również względem izolowanych klinicznie multidrobnopornych szczepów takich jak Staphylococcus epidermidis, Staphylococcus aureus i Pseudomonas aeruginosa. Końcowe testy antybakteryjne na modyfikowanych powierzchniach będą wykonywane zgodnie z protokołem ISO 22196.

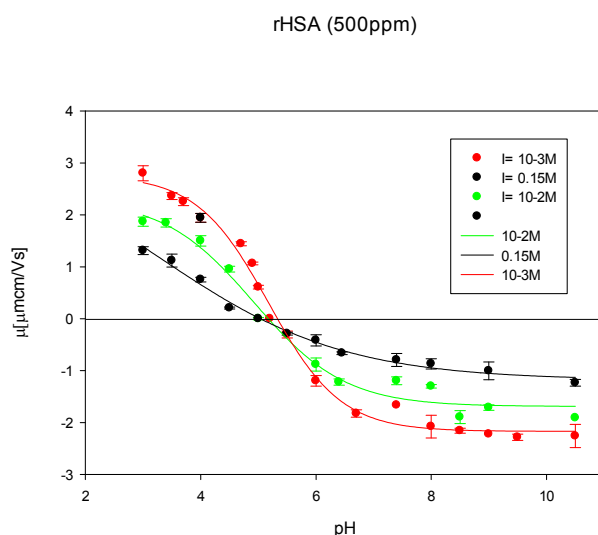
6. Charakterystyka elektrokinetyczna oddziaływań monowarstw HSA rekombinowanego z ligandami jonowymi

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2012/07/N/ST5/02219 [2013-2015]
(kierownik projektu: Marta Kujda, opiekun Zbigniew Adamczyk).

W ramach pierwszego zadania badawczego przeprowadzono obszerną charakterystykę elektrokinetyczną wodnych roztworów monomerów albuminy rekombinowanej (rHSA). Albumina ludzka jest białkiem o unikatowych funkcjach biologicznych. Odgrywa istotną rolę w organizmie, niezbędną do utrzymania prawidłowej homeostazy. Jest nośnikiem substancji o dużym znaczeniu biologicznym szczególnie: kwasów tłuszczowych, jonów, hormonów i witamin. Specyficzna struktura i zdolności wiązania szerokiej gamy ligandów nadają jej także potencjalne znaczenie, jako preparat leczniczy. Dlatego też bardzo istotną kwestią staje się wyznaczenie właściwości fizykochemicznych postaci rekombinowanej albuminy ludzkiej, która jest wolna od domieszki dimerów a także nie wykazuje własności alergogennych. W powyższym celu przeprowadzono szereg następujących pomiarów:

- wyznaczono stopień czystości preparatu oraz oszacowano masę molową rHSA z wykorzystaniem techniki elektroforezy żelowej SDS-PAGE w układzie Laemmliego, z zastosowaniem metody barwienia srebrem.
- wyznaczono współczynnik dyfuzji białka oraz jego średnicę hydrodynamiczną przy pomocy techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS).
- wyznaczono ruchliwość elektroforetyczną białka w funkcji siły jonowej (10^{-3} -0.15M, NaCl) oraz wartości pH w zakresie (3.5-9.0). Z ruchliwości elektroforetycznej wyznaczono także wartości potencjału zeta. Na Rys. 1 przedstawiono zależność ruchliwości elektroforetycznej białka w funkcji siły jonowej i wartości pH.
- na podstawie powyższych pomiarów wyznaczono także punkt izoelektryczny białka równy 5.4.

Tak, więc dla $\text{pH} < 5.4$ rHSA posiada dodatni ładunek powierzchniowy co pozwala na adsorpcję tego białka na powierzchniach o ujemnym ładunku, np. na powierzchniach miki. Adsorpcja taka zostanie przeprowadzona w kolejnych etapach realizacji projektu.



Rysunek 1. Zależność ruchliwości elektroforetycznej rHSA od siły jonowej i wartości pH.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "HARMONIA"

1. Obrazowanie lokalnej kinetyki reakcji katalitycznych dla układów modelowych w skali mezo- i nanoskopowej

Projekt badawczy "Harmonia" NCN 2012/06/M/ST4/00032 [2013-2015]
współpraca polsko-austriacko-szwajcarska
(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Celem projektu jest poszukiwanie korelacji pomiędzy szeroko pojętą strukturą i morfologią, a przebiegiem i kinetyką powierzchniowych reakcji dla modelowych katalizatorów, którymi są metaliczne i tlenkowe nanostruktury otrzymane na podłożach monokrystalicznych i polikrystalicznych. Podstawową metodą badawczą w projekcie jest wysokorozdzielcza mikroskopia elektronów pochodzących z powierzchni próbki. Mikroskop na elektronach niskoenergetycznych (low energy electron microscopy - LEEM) wykorzystywany jest w projekcie również jako mikroskop fotoemisyjny (photoemission electron microscopy - PEEM) z wykorzystaniem zarówno źródeł laboratoryjnych, jak i promieniowania synchrotronowego (X-PEEM).

Dzięki takiej metodyce możliwe będzie obrazowanie szeroko pojętej struktury powierzchniowej (chemicznej, topograficznej, elektronowej) w skali mikrometrowej i nanometrowej, a także monitorowanie zmian powierzchni w wyniku zachodzenia reakcji powierzchniowych. Projekt realizowany jest w ramach trójstronnej współpracy grupy polskiej oraz grupy z Technische Universität Wien oraz ze Swiss Light Source (SLS) w Szwajcarii.

Pierwszy etap realizacji projektu polegał na adaptacji, instalacji i uruchomieniu mikroskopu na wiązce NanoXAS w SLS. W dwóch miesięcznych sesjach pomiarowych zrealizowano serię eksperymentów przygotowanych wstępnie pomiarami laboratoryjnymi z użyciem komplementarnych metod takich jak skaningowa mikroskopia tunelowa (STM) oraz spektroskopia fotoelektronów (XPS).

W wyniku badań opracowano metodykę pomiarów LEEM i PEEM dla próbek polikrystalicznych. Badania prowadzono dla polikrystalicznych folii Pd i Pt, dla których możliwe było zidentyfikowanie ziaren o określonej orientacji i wykonywanie na nich lokalnych pomiarów mikroskopowych i spektroskopowych. Przebadano wzrost tlenku żelaza na ziarnach o różnej orientacji i określono relację pomiędzy strukturą i morfologią tlenku a orientacją podłoża. Dla nanostruktur manganu na monokrystalicznym podłożu W(110), wykorzystując chemiczną zdolność rozdzielczą mikroskopii X-PEEM określono skład chemiczny tlenków manganu powstałych w wyniku utleniania nanometrowych wysepek Mn oraz pokazano występowanie istotnej korelacji pomiędzy grubością adsorbentu Mn, morfologią wysp i ich przestrzennym rozkładem, a stopniem utlenienia. Dla warstw magnetytu otrzymanych epitaksjalnie na powierzchni MgO(001) pokazano występowanie lokalnych obszarów o różnej stechiometrii zmieniającej się między FeO a Fe₃O₄ wykorzystując w tym celu zarówno mikrospektroskopię absorpcyjną (XAS,) jak i fotoemisyjną (XPS).

W kolejnym etapie pracy wyniki synchrotronowe zostaną poddane szczegółowej analizie i ewentualnej weryfikacji z wykorzystaniem metod laboratoryjnych, a głównie skaningowej mikroskopii tunelowej, która pozwoli na uzyskanie informacji innej skali rozmiarów, tj. w skali atomowej. W wyniku realizacji projektu uzyskano niezwykle cenne doświadczenie, które wykorzystane będzie w realizacji polskiego projektu synchrotronowego SOLARIS.

PROJEKTY BADAWCZE MNiSW "IUVENTUS PLUS"

1. Wybrane aspekty oddziaływań pomiędzy kwasami α -L-guluronowym, β -D-mannuronowym a dwuwartościowymi jonami metali

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP IP2011 042471 [2012-2013]

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

Badano strukturalne i energetyczne aspekty oddziaływań pomiędzy dwuwartościowymi jonami metali (wapń, miedź, kadm, cynk) a kwasami α -L-guluronowym oraz β -D-mannuronowym (w formie anionów). Badania obejmowały m.in. poznanie struktury kompleksów jon-kwas i natury ich wzajemnych oddziaływań oraz wyznaczenie profili energii swobodnej pozwalających oszacować ich stabilność.

Z uwagi na brak możliwości zastosowania klasycznych potencjałów oddziaływań jon metalu/uronian, zastosowano metodą dynamiki molekularnej (MD) wg. protokołu QM/MM (*quantum mechanics/molecular mechanics*), co oznacza, że część układu (cząsteczka kwasu uronowego oraz badany jon) modelowane są z dokładnością mechaniki kwantowej; pozostała część -- klasycznej mechaniki molekularnej (model wody TIP3P).

Ustalono, że podstawowym mechanizmem wiązania jonów wapnia, kadmu i cynku przez guluronian i mannuronian jest bezpośrednie oddziaływanie z jednym atomem tlenu grupy karboksylowej (mechanizm 1-SO). Dla miedzi (wyjątkowo) stwierdzono znaczną dominację mechanizmu 2-SO (wkład koordynacji z udziałem obu atomów tlenu grupy karboksylowej). W przypadku wapnia możliwy jest również mechanizm 2-SO; obu stanom jonu wapnia (1-SO i 2-SO) odpowiada różnica energii swobodnej ok. 2,5 kJ/mol (1-SO jest stanem preferowanym). Pozostałe miejsca strefy koordynacyjnej zajmują atomy tlenu należące do cząsteczek wody. Mechanizm wiązania jonów wapnia jest głównie elektrostatyczny, dlatego stany 1-SO i 2-SO dzieli jedynie niewielka bariera energii swobodnej, odpowiadająca reorganizacji cząsteczek wody w pierwszej strefie koordynacyjnej jonu. Ponadto, różnica energii swobodnej oszacowana dla pełnego procesu wiązania się jonów wapnia odpowiada wartościom eksperymentalnym. Przyjęcie mechanizmu 1-SO jako preferowanego dla większości jonów metali jest zgodne z wynikami niedawnych badań [Biomacromolecules 2012, 13, 1899–1907].

Przedyskutowano wpływ efektów polaryzacyjnych na oddziaływanie jon-uronian (na przykładzie wapnia) oraz porównano wyniki z tymi otrzymanymi na podstawie klasycznych pól siłowych (GLYCAM06/TIP3P oraz GROMOS/SPC). Klasyczne pola siłowe, w porównaniu z obliczeniami QM/MM zaniżają barierę energii swobodnej separującą stany jonu 'związany' i 'wolny'. Statyczne optymalizacje geometrii układu uronian/jon potwierdzają, że efekt ten można przypisać polaryzacji grupy karboksylowej, której to klasyczne pola siłowe nie uwzględniają (ładunki są na stałe przypisane do danego atomu).

W perspektywie odnotowanych trudności w eksperymentalnym zbadaniu (a także interpretacji danych) podstawowych właściwości kompleksów jon metalu-kwas uronowy wyniki symulacji (np. wartości parametrów termodynamicznych) mogą posłużyć do lepszej interpretacji już istniejących danych.

2. Nowa metoda syntezy zoli srebra i mechanizm oddziaływania nanocząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy zjawisk elektrokinetycznych oraz metod: AFM, mikroskopii fluorescencyjnej i QCM-D

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2011 0353 71 [2012-2014]

(kierownik projektu: dr Aneta Michna)

Mechanizmy rządzące oddziaływaniem cząstek koloidalnych i polielektrolitów z powierzchniami międzyfazowymi są przedmiotem intensywnych badań. Adsorpcja mikrosfer polistyrenowych oraz polielektrolitów na granicy faz ciało stałe/ ciecz ma ogromne znaczenie w wielu procesach naturalnych jak i w przemyśle, np. w procesie enkapsulacji leków, adhezji komórek, przy tworzeniu nanopowłok na włóknach. Jednakże, zarówno mechanizm oddziaływania cząstka koloidalna- polielektrolit jak również i kinetyka osadzania cząstek i polielektrolitów nie zostały dotychczas określone w dostatecznym stopniu.

W 2013 roku, celem realizowanego projektu było przeprowadzenie gruntownej charakterystyki monowarstw tworzonych przez chlorek poli(dwuallilodwumetyloamoniowy) (PDADMAC) na powierzchni miki, oraz wyznaczenie kinetyki osadzania cząstek srebra oraz fluorescencyjnych cząstek lateksowych na powierzchni międzyfazowej ciało stałe/ ciecz.

Do badania procesów tworzenia i stabilności monowarstw PDADMAC na micy w warunkach *in situ*, wykorzystano jedną z metod elektrokinetycznych- potencjał przepływu. Potencjał zeta miki pokrytej polielektrolitem został obliczony na podstawie zmierzonej wartości potencjału przepływu. Badane monowarstwy były tworzone poprzez adsorpcję PDADMAC z roztworów o różnych o siłach jonowych (10^{-3} -0.15 M) i *pH* 5.8. Dane eksperymentalne przedstawiono w postaci zależności potencjału zeta miki ζ w funkcji pokrycia powierzchni polielektrolitem. Uzyskane wyniki zostały ilościowo zinterpretowane przy użyciu modelu elektrokinetycznego, postulującego trójwymiarowy rozkład ładunku. Wykonane pomiary umożliwiły wyznaczenie potencjału zeta miki pokrytej różną ilością zaadsorbowanego PDADMAC. Stwierdzono, że graniczna wartość potencjału zeta wysyczonej monowarstwy PDADMAC maleje wraz ze wzrostem siły jonowej od 45 mV w sile jonowej 10^{-2} M do 22 mV w 0.15 M. Ponadto, wykorzystując tą samą technikę badawczą zbadano kinetykę desorpcji monowarstwy PDADMAC. Pomiary te prowadzono odmywając monowarstwę czystym elektrolitem, o sile jonowej 10^{-2} M lub 0.15M, w stałym przepływie przez 24 h. Wykonane pomiary umożliwiły wyznaczenie stałych równowagi adsorpcji PDADMAC w różnych siłach jonowych, np. dla 10^{-2} M $K_a=72 \text{ cm}^1$.

Ponadto, przy użyciu mikrowagi kwarcowej z dyssypacją energii, wykonano pomiary kinetyki adsorpcji i desorpcji polielektrolitu na pokrytych złotem kryształach kwarcu. Badania przeprowadzono w różnych siłach jonowych i dla różnych stężeń objętościowych polielektrolitu. Uzyskane wyniki wykazały, iż masa zaadsorbowanego PDADMAC rośnie liniowo wraz ze stężeniem objętościowym polielektrolitu do stałej wartości, np. 69.7, 125.5, 127 ng/cm² przy 20 min adsorpcji z roztworów o stężeniach 5, 7, 10 ppm w 10^{-2} M.

Kinetykę osadzania ujemnych nanocząstek srebra i dodatnich cząstek fluorescencyjnych na micy pokrytej różną ilością polielektrolitu wyznaczono przy użyciu technik: AFM i mikroskopii fluorescencyjnej. Przeprowadzone badania wykazały, że ujemne nanocząstki srebra praktycznie nie osadzały się na monowarstwach polielektrolitu o bezwymiarowych pokryciach $\Theta < 0.1$. Jednakże, dla $\Theta > 0.1$ pokrycie cząstkami gwałtownie wzrastało aż do osiągnięcia wartości maksymalnej. Natomiast pokrycia dodatnimi cząstkami oraz intensywność fluorescencji cząstek osadzonych na micy pokrytej PDADMAC malały wraz ze wzrostem pokrycia powierzchni polielektrolitem.

3. Zaawansowane badania teoretyczne nad reakcją mutarotacji D-glukopiranozy

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2012 006372 [2013-2015]

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

Reakcja mutarotacji węglowodanów jest jednym z fundamentalnych procesów, istotnych z punktu widzenia wielu różnych dziedzin chemii oraz biochemii. Pomimo bycia „podręcznikową” reakcją chemii organicznej, pewne szczegóły mutarotacji ciągle nie są w pełni poznane.

W ramach niniejszego projektu planujemy przeprowadzić szczegółowe badania teoretyczne, zgodnie z protokołem dynamiki molekularnej (MD) w oparciu o potencjały oddziaływań *ab initio* połączone z klasycznymi polami siłowymi (QM/MM *quantum mechanics/molecular mechanics*), co oznacza, że część układu (cząsteczka glukozy oraz cząsteczki wody biorące bezpośredni udział w reakcji katalizujące ją) modelowane są z dokładnością mechaniki kwantowej; pozostała część klasycznej mechaniki molekularnej (model wody TIP3P dla reszty środowiska wodnego).

Początkowe stadium badań obejmowało następujące etapy:

- (i) opracowanie i przetestowanie protokołu symulacji QM/MD w połączeniu z metodami metadynamiki oraz/lub *transition path sampling*;
- (ii) wybór struktur odpowiadających potencjalnym stanom przejściowym, zawierającym cząsteczki wody, katalizujące reakcję otwierania pierścienia (na podstawie danych opublikowanych w J Am Chem Soc. 2006, 128 (15): 5049–5058).

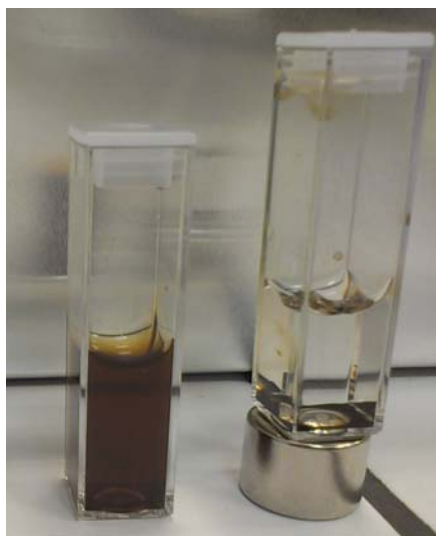
4. Magnetyczne systemy dostarczania leków z możliwością sterowanego uwalniania czynnika aktywnego

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2012 058972 [2013-2015]

(kierownik projektu: dr Krzysztof Szczepanowicz)

Aktualnie stosowane terapie lecznicze nie przynoszą zadowalających efektów, a główną ich wadą jest brak selektywności działania, co może powodować poważne skutki uboczne. Niedoskonałość stosowanych obecnie metod terapeutycznych stanowi genezę tematyki tego projektu. Możliwość selektywnego dostarczenia leku do wybranego organu, tkanki czy komórki niezależnie od miejsca i sposobu jego podania może być osiągnięte różnymi metodami. Jedną z nich jest tzw. magnetyczny system kontrolowania kapsułek, który pozwala przy pomocy pola magnetycznego zatrzymać taką kapsułkę we właściwym miejscu i uwolnić tam substancję terapeutyczną, jeśli jest to potrzebne. Dlatego celem naukowym tego projektu jest opracowanie techniki syntezy magnetycznie sterowanych nanoosników substancji terapeutycznych do wcelowanego dostarczania leków oraz kontrolowanego uwalniania substancji terapeutycznej. Wcelowane dostarczanie leków pozwoli na zwiększenie selektywności preparatów farmakologicznych, co powinno zminimalizować skutki uboczne stosowanych terapii poprzez zmniejszenia toksycznego działania leku w całym organizmie. Podsumowując, podstawowym celem projektu jest opracowanie innowacyjnych rozwiązań dla współczesnej medycyny w celu poprawy poziomu życia ludności.

W 2013 roku skupiono się na zadaniu projektu dotyczącym wbudowania nanocząstek magnetycznych do powłoki nanokapsułki. Nanokapsułki otrzymywano metodą opracowaną w naszym instytucie, tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych(tzw. metodą warstwa po warstwie). Nanocząstki Fe_3O_4 zostały użyte jako jedna z warstw w powłoce polielektrolitowej. Otrzymano magnetyczne kapsułki o średnim rozmiarze 100 nm. Na Rys. 1 możemy zaobserwować wpływ pola magnetycznego na zachowanie się nanokapsułek zawierających nanocząstki Fe_3O_4 .



Rysunek 1. a) Zsyntezowane nanokapsułki zawierające nanocząstki Fe_3O_4 oraz b) umieszczone w polu magnetycznym (na magnesie neodymowym)

PROJEKTY MNiSW "MOBILNOŚĆ PLUS"

1. Czynniki determinujące stabilność ciekłych filmów powstających w warunkach dynamicznych na powierzchniach ciecz-gaz i ciecz-ciało stałe

Projekt "Mobilność Plus" MNiSW [2011-2012]
(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem badań było określenie podstawowych czynników, które decydują o stabilności ciekłych filmów tworzących się na granicy międzyfazowej ciecz/gaz oraz ciecz/ciało stałe w warunkach dynamicznych. W celu weryfikacji zakładanych hipotez, w prowadzonych badaniach użyto unikatowego zestawu eksperymentalnego, który umożliwiał obserwację dynamicznych zjawisk zachodzących podczas zderzeń pojedynczych pęcherzyków gazowych z powierzchnią ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe pozostającą w spoczynku lub też wibrującą z kontrolowanym przyspieszeniem (determinowanym przez częstotliwość i amplitudę drgań). Zestaw ten składał się z: (i) kolumny o przekroju kwadratowym w dnie której zamocowana była kapilara o średnicach z przedziału 0.025-0.075 mm, (ii) szybkiej kamery cyfrowej rejestrującej obraz z częstotliwością 1000 klatek na sekundę, (iii) systemu precyzyjnego dozowania gazu (pompa strzykawkowa) oraz (iv) aparatury pozwalająca na indukcję kontrolowanych zaburzeń (drgań) powierzchni międzyfazowych, tj. elektromagnetycznego shakera oraz generatora fal i oscyloskopu do kontroli częstotliwości i amplitudy. Pomiar prowadzono w wodzie destylowanej oraz olejach silikonowych o zdefiniowanej lepkości oraz napięciu powierzchniowemu. Głównymi parametrami, które badano był: (i) czas koalescencji (t_c) lub czas utworzenia kontaktu trójfazowego (t_{TPC}), tj. czas liczony od momentu pierwszego uderzenia pęcherzyka w powierzchnię do momentu jego pęknięcia, oraz (ii) stopień deformacji pęcherzyka podczas zderzeń z badanymi powierzchniami międzyfazowymi.

Przeprowadzone badania pozwoliły uzyskać nowe i mocne dowody na to, iż stopień deformacji pęcherzyka, determinujący promień ciekłego filmu jest parametrem odgrywającym bardzo ważną rolę w kinetyce jego odbić i czasów koalescencji i/lub utworzenia TPC. Dzięki porównaniu wyników uzyskanych dla swobodnych, spoczywających powierzchni oraz dla powierzchni drgających z określoną częstotliwością i amplitudą (przyspieszeniem) wyjaśniony został mechanizm odpowiadający za prawdopodobieństwo odbić pęcherzyka od powierzchni. Wykazano, że to czy pęcherzyk pęknie, czy też odbije się od powierzchni międzyfazowej zależy od wzajemnych relacji pomiędzy kinetyką wyciekania filmu ciekłego, a szybkością wymiany energii kinetycznej związanej z ruchem pęcherzyka na energię powierzchniową (potencjalną) związaną ze wzrostem deformacji (powierzchni) podczas zderzenia. Jeśli do wymiany energii dochodziło szybciej w porównaniu z czasem potrzebnym do tego, aby ciekły film osiągnął krytyczną grubość pęknięcia, pęcherzyk odbijał się. Jeśli natomiast sytuacja była odwrotna, obserwowano pęknięcie pęcherzyka, a miało to miejsce zawsze wtedy, kiedy energia kinetyczna była już znacznie rozproszona (4-5 cykl "dojście-odbicie" pęcherzyka). W konsekwencji niewielka była także deformacja pęcherzyka, a więc i promień wyciekającego filmu. Eksperymenty przeprowadzone dla wibrującej powierzchni ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe pozwoliły zaobserwować efekt "nieśmiertelności" pęcherzyków na badanych powierzchniach. Dzięki temu, że powierzchnia drgała z określoną częstotliwością i amplitudą, część jej energii kinetycznej zostawała przekazana pęcherzykowi, który odbijał się od powierzchni tak, że promień powstającego filmu był stały i zawsze większy od wartości granicznej, poniżej której pęknięcie pęcherzyka było zawsze obserwowane. Pęcherzyk w takich warunkach mógł odbijać się na powierzchni międzyfazowej w nieskończoność, nawet na powierzchni czystej wody, na której, w normalnych warunkach pęka w ułamku sekundy (<100 ms).

PROJEKTY FNP "POMOST"

1. Selektywna hydrogenoliza gliceryny do glikoli via acetol na katalizatorach heterogenicznych zawierających metale i tlenki metali.

Projekt "Pomost" FNP POMOST/2011-3/7 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Katarzyna Samson)

W minionym okresie sprawozdawczym (rok 2013) realizowano poszczególne zadania badawcze zgodnie z zaplanowanym harmonogramem projektu.

1. Zakończono preparatykę katalizatorów: a) zawierających aktywną fazę miedziową naniesioną na spreparowane spinele chromitowe (w ilości 5, 10, 15, 20 i 30% wag. CuO, metoda impregnacji, obróbka termiczna: suszenie w 120°C - 10h, prażenie w 350°C - 5h w przepływie powietrza), b) zawierających Cu i Ag naniesione metodą impregnacji na tlenki TiO₂ i Al₂O₃ (obróbka termiczna j.w.); zawartość miedzi w obu seriach wynosi 2-6 mmol/1g nośnika, w przypadku katalizatorów bimetalicznych zawartości miedzi i srebra wynoszą 0-1,5mmol metalu/1g nośnika.
2. Na podstawie aktualizacji przeglądu literaturowego wykonano katalizator miedziowo-chromowy CuCr, o stosunku atomowym Cu/Cr = 4 metodą zol-żel, z azotanów miedzi i chromu (rozpuszczonych w alkoholu etylowym) oraz tlenkiem propylenu, jako czynnikiem strącającym (suszenie 75°C 40h, prażenie w przepływie argonu 2h w 500°C), metoda alternatywna do stosowanych wcześniej metod preparatyki tj. cytrynianowej i "Adkinsa".
3. Wykonano charakterystykę fizykochemiczną: a) zsyntetyzowanych nośników chromitowych Me_{II}Cr₂O₄, gdzie Me=Cu, Co, Zn, Ni, Mg, Fe i Mn, b) katalizatorów serii CuO/chromit metalu i c) serii Cu-Ag/tlenek metalu (TiO₂, Al₂O₃) obejmującą określenie struktury i tekstury metodami BET, XRD, SEM (dla wybranych preparatów), składu (XRF) oraz właściwości redukująco-utleniających za pomocą pomiarów H₂TPR; badania są kontynuowane.
4. Rozpoczęto testy katalityczne zsyntetyzowanych katalizatorów serii CuO/chromit metalu (dla próbek na chromitach CuCr₂O_{4Adkins}, CuCr₂O_{4cytr.}, FeCr₂O₄) oraz serii Ag-Cu/tlenek metalu w reakcji hydrogenolizy glicerolu wg opracowanej wcześniej procedury: wstępna redukcja (150°C, 100 obr./min., 2h), hydrogenoliza (200°C, 400 obr./min., 5h, p_{H₂}=15atm). Ze względu na stosunkowo niską aktywność badanych próbek zdecydowano o zmianie warunków badanej reakcji (wstępnej redukcji 200°C i p_{H₂} 5atm., czasu: 20h i 26h, ciśnienia H₂: 40atm) oraz warunków obróbki termicznej katalizatorów (500°C). Najwyższe selektywności do pożądaných dioli otrzymano dla próbek: 30%wag.CuO/CuCr₂O₄, 2Cu/Al₂O₃, 4Cu/Al₂O₃, 6Cu/Al₂O₃; badania są kontynuowane.
5. Pierwsza stypendystka projektu Pomost obroniła w 2013 roku na Wydziale Chemii UJ pracę magisterską pt. „Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów opartych na chromitach metali dwuwartościowych do reakcji selektywnej hydrogenolizy glicerolu” (z wynikiem bardzo dobrym).
6. Przeprowadzono (z wynikiem pozytywnym) rekrutację drugiego stypendysty, realizującego pracę magisterską będącą częścią projektu Pomost, zgodnie z procedurami wymaganymi przez FNP; stypendysta od września 2013 roku pracuje w projekcie.

PROJEKTY STRATEGICZNE NCBiR

1. Projektowanie katalizatorów do rekombinacji wodoru i tlenu pod kątem kontroli ich aktywności jako czynnika o krytycznym znaczeniu dla bezpieczeństwa pracy rekombinatorów w instalacjach nuklearnych

Strategiczny projekt badawczy NCBiR SP/J/7/170071/12 [2012-2015]

(kierownik projektu: prof. Alicja Drelinkiewicz)

Badania w projekcie dotyczą określenia czynników wpływających na aktywność nośnikowych katalizatorów metalicznych w reakcji rekombinacji wodoru i tlenu z utworzeniem wody. Ta silnie egzotermiczna reakcja ($H_2 + 0.5 O_2 = H_2O + 240 \text{ kJ}$) stanowi problem z punktu widzenia bezpieczeństwa reaktorów nuklearnych (zagrożenie eksplozją), gdyż przebiega stale w wyniku permanentnego tworzenia wodoru. W reaktorach nuklearnych stosowane są pasywne katalityczne rekombinatory (passive autocataytic recombiners, PAR). Zawierają one platynę osadzoną na podłożu z tlenku glinu („wash-coat”-type). Katalizator powinien być aktywny w temperaturze pokojowej jak i powinien być odporny na obecność wody, ze względu na wysoki poziom wilgoci w obudowie reaktora nuklearnego.

Celem badań w obecnym projekcie jest poznanie czynników wpływających na aktywność katalizatorów uzyskanych poprzez osadzenie cząstek metali (platyny, palladu) na podłożach tlenkowych i metalicznych (blachy) w reakcji rekombinacji wodoru i tlenu. Przeprowadzono syntezę szeregu katalizatorów mono i bimetalicznych o zmiennej zawartości metali (0.2-4 wt%) metodą impregnacji oraz metodą "water-in-oil" mikroemulsji odwróconej. Metoda ta umożliwia uzyskanie katalizatorów o z góry zadanej wielkości nanocząstek metalu jak i kontrolowanym stężeniu powierzchniowym metalu.

Badania przeprowadzone w roku 2013 dotyczyły właściwości (aktywność, stabilność) mono (Pd, Pt) i bimetalicznych katalizatorów w reakcji rekombinacji wodoru i tlenu. Badania obejmowały następujące zagadnienia

- synteza katalizatorów z zastosowaniem różnych nośników: Al_2O_3 , SiO_2 , MoO_3 i WO_3 jako nośniki dla monometalicznych Pd i Pt katalizatorów (0.2–2 wt% Pd lub Pt); bimetaliczne Pd-Pt i Pd-Au o różnym stosunku metali, montmorylonity (dotowane Al i Zr) - katalizatory Pd, katalizatory Pd-(WO_3)₁₂
- charakteryzacja właściwości fizykochemicznych katalizatorów; teksturalnych (powierzchnia właściwa, porowatość; BET) i fazy metalicznej (wielkość nanocząstek metali, ich rozkład w matrycy nośnika, TPR, XRD, SEM, TEM, EDS)
- pomiary aktywności katalitycznej w laboratoryjnym reaktorze przepływowym
- określenie efektu termicznego towarzyszącego reakcji rekombinacji wodoru i tlenu z zastosowaniem mikrokalorymetru przepływowego (Microscal)
- modelowanie oddziaływań elektronowych w układach Pd, Pt - MoO_3 , WO_3

Pomiary aktywności katalitycznej w reaktorze przepływowym pokazały, że większość katalizatorów to wysoko aktywne preparaty (prawie całkowita konwersja wodoru) już w reakcji prowadzonej w temperaturze pokojowej. Katalizatory różniły się stabilnością pracy w warunkach przepływu reagentów. Mogło to być spowodowane różną (zbyt wysoką) wrażliwością katalizatorów na obecność wody (tworzonej w reakcji), określoną m.in. przez rodzaj nośnika. Kolejnym czynnikiem mogła być różna zdolność do agregacji nanocząstek metali, która również prowadzi do spadku aktywności. Badania mikrokalorymetryczne pokazały, że ilość wydzielanego ciepła w rekombinacji wodoru i tlenu jest zależna od rodzaju metalu (Pd, Pt, Pd-Pt, Pd-Au) w katalizatorze. Najlepsze właściwości, pod kątem konwersji wodoru, wydzielonego ciepła oraz stabilności termicznej uzyskano dla układów bimetalicznych Pd-Pt, a w szczególności dla katalizatorów zawierających nanocząstki Pd-Au.

PROJEKTY BADAŃ STOSOWANYCH NCBiR

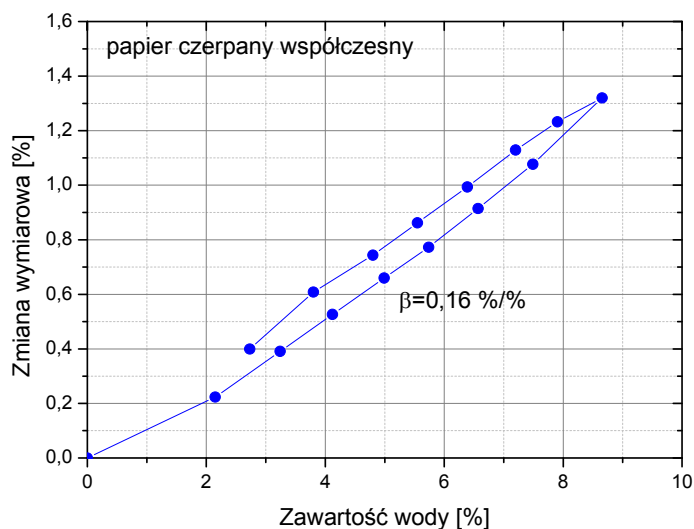
1. HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych

Program Badań Stosowanych NCBiR HERIVERDE PBS2/A9/24/2013 [2013-2016]
wspólnie z Muzeum Narodowym w Krakowie
(kierownik projektu: prof. Roman Kozłowski)

Projekt dotyczy opracowania dwóch narzędzi wspierających efektywność energetyczną muzeów, bibliotek i archiwów znajdujących się w budynkach zabytkowych: oprogramowanie służące ilościowej ocenie zagrożenia obiektów wrażliwych na zmiany parametrów klimatu oraz specjalistycznego modułu oprogramowania WUFI® Plus umożliwiającego bardziej precyzyjne modelowanie mikroklimatu i zużycia energii w muzeach, bibliotekach i archiwach. Narzędzia te nie istnieją w obecnej praktyce ochrony zbiorów. Zostaną one wszechstronnie przetestowane przez monitorowanie zużycia energii, mikroklimatu oraz odpowiedzi wymiarowej obiektów modelowych w rzeczywistych warunkach wybranych budynków mieszczących zbiory, należących do partnerów projektu - Muzeum Narodowego w Krakowie i Biblioteki Narodowej w Warszawie. Uzyskane wyniki posłużą przygotowaniu wielowariantowych, energooszczędnych strategii zarządzania klimatem w tych budynkach.

Głównym zadaniem instytutu w projekcie jest modelowanie transportu pary wodnej, odkształceń i naprężeń w różnorodnych obiektach bibliotecznych i muzealnych w odpowiedzi na zmieniające się warunki klimatyczne, przy zastosowaniu analizy metodą elementów skończonych, wspartej pomiarami fizycznych właściwości materiałów. To narzędzie badawcze umożliwi naukową ocenę wpływu wahań parametrów mikroklimatycznych na proces niszczenia obiektów zabytkowych.

Projekt rozpoczął się w listopadzie 2013. Zainicjowano program pomiarów adsorpcji pary wodnej oraz wilgotnościowej odpowiedzi wymiarowej materiałów wchodzących w skład obiektów bibliotecznych: różnego rodzaju papierów, tektury, skór oraz pergaminu.



Rysunek 1 Zmiana wymiarowa współczesnego papieru czerpanego w funkcji zawartości wody; z nachylenia liniowej części wykresu wyznacza się współczynnik wilgotnościowej zmiany wymiarowej β .

PROJEKTY NCBiR "LIDER"

1. Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej

Projekt badawczy "Lider" NCBiR LIDER/33/147/L-3/11/NCBR/2012 [2012-2015]

(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

Celem projektu jest opracowanie metody enzymatycznej, regioselektywnego hydroksylowania pochodnych cholesterolu w pozycji C25, z wykorzystaniem nowego enzymu molibdenowego (S25DH). W roku 2013 realizowano dwa główne cele badawcze: opracowanie systemu nadekspresji S25DH w komórkach *E. coli* (zadanie 2) oraz opracowanie metody tlenowego i optymalizacji metody beztlenowego oczyszczania enzymu z bakterii natywnej w celu zastosowania go do regioselektywnej hydroksylacji (zadania 3 i 4).

Prace nad otrzymaniem systemu nadekspresji z enzymu skupiły się na konstrukcji sztucznego operonu zawierającego geny kodujące 3 podjednostki S25DH ($\alpha\beta\gamma$) oraz białko chaperonowe odpowiedzialne za insercję kofaktora molibdenowego do enzymu. Zastosowano dwie metodologie opracowania operonu: i) opartą o klonowanie poszczególnych podjednostek z genomu bakterii natywnej oraz ii) opartą o geny zsyntetyzowane *de novo* o sekwencji optymalizowanej pod bakterie *E. coli*. Uzyskane konstrukty sklonowano do plazmidów produkcyjnych i przeprowadzono transformacje kompetentnych bakterii *E. coli*. Wstępne wyniki wykazują, że system nadekspresji pozwala na produkcję podjednostki α i γ .

W ramach realizacji zadania 3 i 4 opracowano dwie metody oczyszczania enzymu: w warunkach tlenowych w oparciu o kolumny DEAE-Sepharose i Q Sepharose oraz w warunkach beztlenowych w oparciu o kolumny DEAE-Sepharose i Resource Q. W obydwu przypadkach uzyskano preparaty enzymatyczne wykazujące aktywność S25DH, ale metoda tlenowa, wykorzystująca złożę Q-Sepharose nie jest w stanie oddzielić z preparatu enzymu Acmb, który również modyfikuje strukturę chemiczną substratu. Dodatkowo opracowano szybką metodę weryfikacji czystości preparatu metodą HPLC z wykorzystaniem kolumny typu Poroshell RP-C18 o szerokich porach. Metoda ta pozwala na szybkie badanie profili białkowych frakcji w trakcie oczyszczania i stanowi alternatywną metodę charakteryzacji do elektroforezy w układzie SDS-PAGE.

Uzyskane preparaty S25DH wykorzystano do konwersji 7-dehydrocholesterolu, cholest-1,4-dien-3on, α - i γ -tokoferoli, cholesterolu pegylowanego (PEG 400) oraz estrów cholesterolu z kwasem siarkowym i bursztynowym. W długoterminowych reakcjach w reaktorach okresowych wykorzystujących wysokie stężenie akceptora elektronowego $K_3[Fe(CN)_6]$ przeprowadzono konwersję 7-dehydrocholesterolu oraz cholest-4-en-3onu uzyskując wysokie konwersje (50-100%). W przypadku substratów tokoferolowych uzyskano potwierdzenie obecności wysokiej aktywności enzymatycznej związków, jednak reakcja niespecyficznego utleniania z akceptorem elektronowych tokoferoli uniemożliwiła identyfikację produktów metodami LC-MS.

PROJEKTY 7. PROGRAMU RAMOWEGO UE

1. NEXT-GTL Innovative Catalytic Technologies & Materials for Next Gas to Liquid Processes



Projekt EC 7th FP NEXT-GTL (IP) [2008-2013]
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Celem projektu było opracowanie katalizatorów do przeróbki gazu ziemnego. Projekt obejmował kilka grup zagadnień takich jak: selektywne utlenianie metanu do CH₃OH/DME na katalizatorach opartych na kompleksach karbenowych i heteropolikwasach czy aromatyzacja metanu na katalizatorze opartym o tlenek molibdenu(VI) osadzony w zeolicie ZSM-5: MoO₃/ZSM-5. Działalność instytutu koncentrowała się w trzech grupach badawczych.

W ramach zadania 2.1b zadaniem grupy badawczej z IkiFP PAN było przygotowanie katalizatorów opartych na heteropolikwasach. Następujące układy zostały zsyntezowane i scharakteryzowane, przy użyciu różnorodnych technik fizykochemicznych, pod kątem ich użyteczności w procesach utleniania: oparte na strukturze anionów Keggina (heteropolikwasy HPMo modyfikowane jonami Co w pozycji kationu kompensującego, heteropolikwasy HPMo modyfikowane jonami V w pozycji atomu addenda, osadzone na nośniku SBA-15, sole miedziowe kwasów HPW, sole potasowe heteropolikwasów HPW zawierające jony Cu w pozycji atomu addenda) oraz oparte na strukturze anionów lakunarnych, układy zawierające 4-atomowe klaster miedzi pomiędzy anionami Keggina.

W ramach zadania 2.1c działalność IkiFP PAN skoncentrowana była na teoretycznym modelowaniu mechanizmu aktywacji wiązania C-H w metanie i jego dalszemu utlenianiu z udziałem katalizatorów opartych na heteropolikwasach. Wyznaczono barierę aktywacji wiązania C-H, na karbonowych kompleksach metaloorganicznych Pt, równą odpowiednio 45 i 27 kcal/mol odpowiednio dla kompleksu 4- i 3-koordynacyjnego. Wyniki modelowania heteropolikwasów pokazały, że właściwości katalityczne tych układów silnie zależą od struktury chemicznej układu. Modyfikacja w obrębie jonu centralnego wpływa silnie na właściwości redoksove układów (korelacja energii LUMO z wyznaczonymi eksperymentalnie wartościami potencjału redoks). Zmiana w pozycji atomów addenda prowadzi do zmian właściwości nukleofilowych centrów aktywnych (korelacja pomiędzy właściwościami utleniającymi a wielkością przerwy energetycznej w widmach DOS). Wyniki obliczeń pokazały, że oddziaływanie rodnika CH₃ z heteropolikwasem prowadzi do utworzenia ugrupowania metoksy CH₃-O bądź prekursora alkoholu, odpowiednio w przypadku oddziaływania z centrami tlenowymi czy grupami OH obecnymi w anionie Keggina, czego konsekwencją jest wydłużenie i osłabienie wiązań metal-tlen w strukturze heteropolikwasu.

W ramach zadania 3.1c badano proces przemiany metanu w etylen (będącej pierwszą fazą aromatyzacji CH₄ do benzenu), zachodzącym na katalizatorze MoO₃/ZSM-5. Wymodelowano pełną ścieżkę reakcji, w trakcie której po fizysozpcji cząsteczki CH₄ na powierzchni katalizatora następuje aktywacja wiązania C-H metanu. Proces ten ułatwiony jest przez wcześniejszą redukcję katalizatora. Rozpad metanu prowadzi do utworzenia grupy CH₂ związanej z jonem molibdenu. Na skutek rekombinacji dwu takich grup powstaje etylen, który następnie desorbuje. Kondensacja cząsteczek etylenu, prowadząca do utworzenia benzenu, następuje w porach zeolitu ZSM-5. Następnie zbadano wpływ wielkości oraz składu fazy aktywnej (Mo/C/O) na wysokość bariery aktywacji metanu. Stwierdzono, że rozerwanie wiązania C-H wymaga najmniejszego nakładu energetycznego, gdy następuje na klastrze składającym się z dwóch lub trzech oktaedrów tlenowo-molibdenowych. Gdy zmienia się skład pierwiastkowy fazy, osiągnane jest dalsze obniżenie bariery aktywacji.



2. F3 Factory Flexible, Fast and Future Factory European Chemistry Consortium Begins the Journey into the Future of Production

Projekt EC 7th FP CP-IP 228867-2 F3 (IP) [2009-2013]

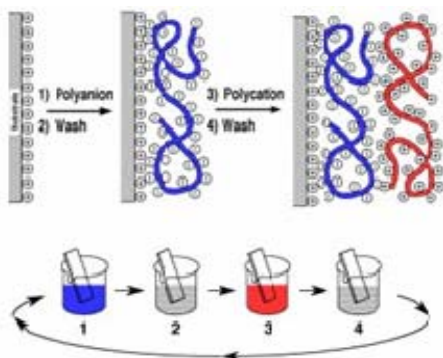
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Konsorcjum F3 zakłada, że przemysł chemiczny w EU powinien zwiększyć swoją konkurencyjność poprzez stosowanie ciągłych instalacji modułowych operujących w średnich i małych skalach produkcyjnych (Instalacje F3). Koncepcja F3 zakłada osiągnięcie produkcji bardziej ekonomicznej, ekologicznej i wydajnej niż stosowane obecnie metody produkcji, np.: ciągłej na skalę światową czy produkcji jednostkowej typu 'batch' na mniejszą skalę. Zastosowanie koncepcji F3 powinno wzmocnić europejski przemysł chemiczny względem ich światowych odpowiedników.

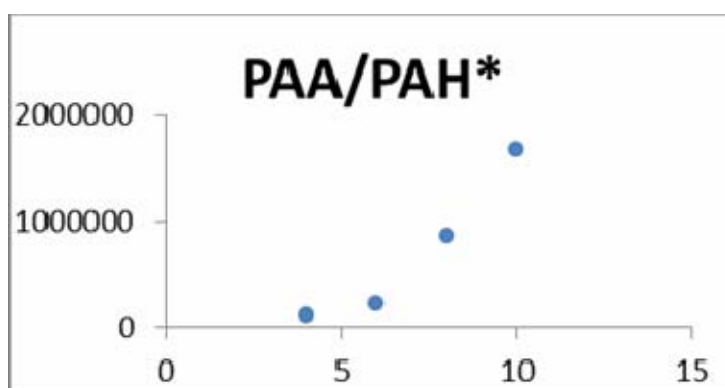
Jednym z dwóch kluczowych celów projektu F3 jest opracowanie nowej technologii produkcji przemysłowej opartej na modułowej, uniwersalnej oraz elastycznej instalacji, na instalacji mogącej służyć nie tylko jednemu dedykowanemu procesowi, lecz instalacji adoptowalnej do wielu procesów produkcyjnych. W osiągnięciu tego celu zaproponowano użycie filozofii "włącz i używaj" ("plug-and-play"). Drugi cel to tzw. intensyfikacja procesu, która odbędzie się na następujących poziomach:

- Wykorzystanie istniejącej wiedzy w celu polepszenia procesu produkcyjnego,
- Zaprojektowanie/zastosowanie nowych urządzeń (np. nowe reaktory, katalizatory).

Naszym zadaniem w projekcie była walidacja technologii F3. Badania przeprowadzone w Instytucie dotyczyły oceny właściwości adsorpcyjnych poli(kwasu akrylowego) PAA otrzymanego z monomeru kwasu akrylowego pochodzącego z bio-źródła, w nowym procesie produkcyjnym. W roku 2013 skupiono się na badaniu właściwości adsorpcyjnych PAA za pomocą pomiarów fluorescencyjnych. Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe zawierające nowy typ PAA oraz znakowany fluorescencyjnie polikation PAH tworzą przy użyciu metody warstwa po warstwie (Rysunek 1). Na Rysunku 2 przedstawiono przykładową zależność intensywności fluorescencji od liczby warstw w tworzonym filmie. Zaobserwowano wzrost intensywności fluorescencji wraz z ilością warstw tworzących film, wzrost ten potwierdził utworzenie struktury wielowarstwowej filmu.



Rysunek 1. Metoda adsorpcji warstwa po warstwie

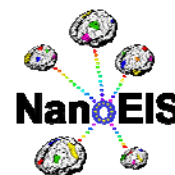


Rysunek 2. Wzrost intensywności fluorescencji wraz z ilością warstw w tworzonym filmie.

Uzyskane wyniki wykazały, że właściwości adsorpcyjne polikwasu akrylowego uzyskiwanego z surowców naturalnych w procesie F³ nie różnią się od właściwości komercyjnego, syntetycznego PAA.

3. NANOEIS Nanotechnology Education for Industry and Society

Projekt EC 7th FP NMP-2012-CSA-6 NANOEIS (CSA) [2012-2015]
(kierownik projektu: prof. Józef Korecki, dr Dorota Rutkowska-Żbik)



Nanotechnologia jest wymieniana jako jedna z kluczowych technologii w przyjętym przez Unię Europejską pakiecie na rzecz rozwoju badań naukowych, innowacji i konkurencyjności w Europie – "Horyzont 2020". Stwarza to poważne wyzwania w stosunku do edukacji i upowszechniania wiedzy w zakresie nanonauki i nanotechnologii. Widząc potrzebę ewaluacji istniejącego systemu nauczania w dziedzinie nanotechnologii, w ramach działań koordynujących i wspierających Unia Europejska prowadzi analizę kształcenia w dziedzinie nanotechnologii dla przemysłu i społeczeństwa poprzez projekt NanoEIS: Nanotechnology Education for Industry and Society. Prowadzone w ramach projektu badania mają na celu ocenę stanu edukacji w zakresie nanotechnologii i sformułowanie rekomendacji dotyczących jej ewentualnych zmian tak, aby odpowiadała ona rzeczywistym potrzebom rynku pracy oraz skutkowało podniesieniem wiedzy ogółu społeczeństwa.

IKiFP PAN zaangażowany jest w ocenę edukacji w dziedzinie nanotechnologii i opracowanie materiałów szkoleniowych (w tym zadaniu Instytut pełni rolę partnera wiodącego - WP leader).

Przeprowadzono analizę treści podstawy programowej w dziedzinie edukacji przyrodniczej oraz kierunków studiów pod kątem odniesień do nanotechnologii. Z reguły w Europie nanotechnologia nie stanowi osobno nauczanego przedmiotu na poziomie szkół średnich. Edukacja na tym etapie kształcenia koncentruje się raczej wokół klasycznych dziedzin nauki, jakkolwiek pojawiają się czasem treści związane z nanotechnologią. W Polsce elementy nanotechnologii znajdują się w programie nauczania przyrody w liceach. Stwierdzono jednak, że istnieje zagrożenie ich pominięcia, co związane jest z dużą dowolnością wyboru treści nauczania, uzależnioną od zainteresowań uczniów i przygotowaniem nauczycieli. Pełne nauczanie nanotechnologii możliwe jest natomiast w dalszych etapach kształcenia, podczas studiów pierwszego, drugiego i trzeciego stopnia. Jak pokazała analiza programów nauczania nanotechnologii na studiach wyższych, kluczowe dla dobrego dopasowania profilu absolwenta do realnych potrzeb pracodawców, jest włączenie tych ostatnich w proces nauczania studentów.

Rozpoczęto zadanie mające na celu opracowanie modelowego programu nauczania nanotechnologii. Zapoznano się wstępnie z dostępnymi materiałami szkoleniowymi, powstałymi w trakcie realizacji innych projektów europejskich poświęconym nowoczesnemu kształceniu w dziedzinie nanotechnologii.

4. HYPERCONNECT Functional Joining of Dissimilar Materials Using Directed Self-assembly of Nanoparticles by Capillary-Bridging

Projekt EC 7th FP 310420 HYPERCONNECT (CP) [2013-2015]

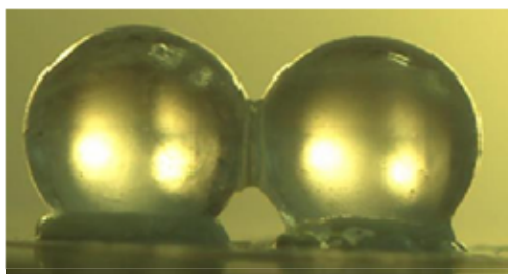
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Zachowanie konkurencyjności na rynku mikroelektroniki wymaga aby przyszłe produkty cechowały się wysokimi parametrami eksploatacyjnymi i funkcjonalnością przy zmniejszonych kosztach wytwarzania i energochłonności. Dla realizacji tego celu niezbędne jest wytwarzanie systemów o dużym stopniu zintegrowania, w których koniecznością jest funkcjonalne łączenie różnych materiałów. W szczególności, ze względu na wysoki stopień integracji, połączenia te powinny zapewnić dobre przewodnictwo ciepła lub prądu elektrycznego przy zwiększonej liczbie połączeń (na jednostkę powierzchni) i wysoką niezawodność.

Główną ideą projektu jest opracowanie nowatorskiej metodologii łączenia elementów mikroukładów elektronicznych za pomocą materiałów o wysokiej przewodności elektrycznej, termicznej oraz dobrych właściwościach termomechanicznych. Koncepcja projektu HyperConnect zakłada stworzenie nowych funkcjonalnych połączeń pomiędzy różnymi materiałami kompozytowymi (np. materiały ceramiczne i półprzewodnikowe, laminaty organiczne z metalicznymi ścieżkami). Mają one postać mostków kapilarnych (szybki z nanocząstek) utworzonych pomiędzy mikrocząstkami. Równolegle z pracami doświadczalnymi będą prowadzone prace teoretyczne w celu: optymalizacji geometrii połączeń, parametrów zastosowanych materiałów, a także analizy niezawodności uzyskiwanych połączeń.

Projekt "HyperConnect" jest realizowany przez konsorcjum, w którym uczestniczy pięć jednostek naukowych: Fraunhofer-Gesellschaft (Niemcy), SINTEF (Norwegia), Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. J.Habera PAN (Polska), Technische Universitaet Chemnitz (Niemcy), Stiftinga Vestlandsforskning (Norwegia) oraz pięciu partnerów przemysłowych: IBM Research GMBH (Szwajcaria), LORD (Niemcy), Intrinsic Materials Ltd. (Wielka Brytania), Angewandte Micro-Messtechnik (Niemcy), Conpart AS (Norwegia).

W pierwszym roku projektu nasze prace koncentrowały się na rozwinięciu technologii tworzenia mostków kapilarnych Al_2O_3 metodą zol-żel. Mostki były tworzone pomiędzy modelowymi mikrosferami szklanymi lub z tlenku aluminium używając izopropanolanu glinu jako prekursora. Określono zależność geometrii mostków od stężenia prekursora. W następnym etapie do roztworu prekursora wprowadzano nanocząstki materiałów o wysokim przewodnictwie cieplnym lub elektrycznym (SiC , AlN , Al_2O_3 , cBN , Si_3N_4 , Cu , grafen) i badano przebieg formowania mostków kapilarnych w takich układach. Rysunek 1 ilustruje przykładowe mostki kapilarne utworzone pomiędzy mikrosferami szklanymi z 7% roztworu prekursora - izopropanolanu glinu. Na rysunku po lewej dodatkowo do roztworu wprowadzono 1% wt. grafenu.



Rysunek 1. Mostek kapilarny z 7% roztworu izopropanolanu glinu.



Rysunek 2. Mostek kapilarny z nanocząstkami grafenu (1%)

Uzyskane wyniki zostaną wdrożone w przemyśle elektronicznym przez partnerów projektu.

PROJEKTY AKCJI COST UE

1. Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials



Projekt EU COST Action CM1101 [2012-2016]

(koordynator: prof. Piotr Warszyński,

przedstawiciel instytucji koordynującej: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Fizykochemia koloidów jest stale rozwijającą się dziedziną wiedzy mającą duże znaczenie praktyczne. Nie można przecenić ogromnego zróżnicowania układów koloidalnych w tworzeniu nowoczesnych materiałów i ich zastosowaniu we współczesnych technologiach oraz w życiu codziennym. Z tego względu istnieje stale pole do rozszerzania współpracy naukowców europejskich zajmujących się koloidami, a także koordynacji prowadzonych przez nich projektów. Akcja COST CM1101 umożliwia podjęcie działań spójnie łączących wiedzę i doświadczenie europejskich ośrodków badawczych i promuje współpracę w zakresie: teoretycznego modelowania i badań eksperymentalnych nad procesami tworzenia funkcjonalnych i nanostrukturalnych powierzchni; samoorganizacji cząsteczek i nanocząstek; wytwarzania nowych nano- i mikrocząstek z materiałów syntetycznych i naturalnych; badań nad właściwościami katalitycznymi nowoczesnych materiałów i ich zastosowaniem w przemyśle chemicznym, farmaceutycznym i spożywczym jak również w nano-urządzeniach takich jak czujniki, sensory, ogniwa fotowoltaiczne lub bio-ogniwa paliwowe. Zastosowanie nowoczesnych materiałów i procesów opartych na wiedzy w dziedzinie fizykochemii koloidów pozwoli na podjęcie wyzwań i rozwiązanie szeregu istniejących problemów w dziedzinie energii, ochrony zdrowia i środowiska naturalnego.

Akcja COST CM1101 stanowi platformę dla koordynacji narodowych programów i będzie stymulować współpracę środowisk akademickich z przemysłem. Głównymi instrumentami działań Akcji są: organizacja wydarzeń naukowych (konferencje, warsztaty), szkół tematycznych dla studentów i doktorantów oraz STSM-ów, czyli krótkich pobytów badawczych w jednostkach partnerskich.

Działania w ramach Akcji grupują się w sześciu grupach roboczych (WGs). Odpowiadają one sześciu podstawowym domenom w zakresie fizykochemii koloidów: (i) powierzchnie; (ii) oddziaływania; (iii) synteza nanocząstek i koloidów; (iv) kinetyka procesów koloidalnych; (v) produkty oraz (vi) urządzenia. Tematy grup roboczych 1 i 2 są związane z podstawowymi aspektami oddziaływań w układach zdyspergowanych związanych z procesami molekularnymi na powierzchniach międzyfazowych i w układach samoorganizujących się. Prace grup roboczych 3 i 4 koncentrują się na procesach syntezy nanocząstek i innych nano-koloidalnych materiałów, ich kinetyce i zastosowaniu w katalizatorach. Działalność grup roboczych 5 i 6 dotyczy aplikacji nanomateriałów i nowych procesów nanotechnologicznych w praktyce.

W 2013 roku zorganizowano kilka spotkań w ramach Grup Roboczych (WG), m.in.: "Synthesis, Kinetics and Catalytic Aspects of Biocolloids" w La Valetta na Malcie, "Dynamics of Self-Assembly" w Delft w Holandii, "The balance of interactions in soft matter systems: Thermodynamics, structure and kinetics" w Nikozji, na Cyprze, "Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites" w Szeged, na Węgrzech, "Dynamics of Liquid Interfaces", w Poczdamie w Niemczech. Coroczna konferencja Akcji COST CM1101 odbyła się podczas konferencji ECIS 2013 w Sofii w Bułgarii. W Genewie w Szwajcarii zostały zorganizowane warsztaty dla studentów pod nazwą 'CM1101 School on Surface Analytical Techniques "Probing Macromolecules at Water-Solid Interfaces"', 14th European Student Colloid Conference and CM1101 training School w Poczdamie a Pre-conference ECIS COST CM1101 Training Course "Colloids and Medical Applications" w Sofii. Dodatkowo zorganizowano 16 STSM - krótkich staży dla naukowców.

Oficjalną stronę Akcji zawierającą aktualne informacje można znaleźć pod adresem: <http://projects.um.edu.mt/cm1101/>.

**PROJEKTY POLSKO NORWESKIEJ
WSPÓŁPRACY BADAWCZEJ**

1. NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies Against Neurodegenerative Diseases

Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej 199523/64/2013 NANONEURAC (core) [2013-2016]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Zapobieganie i leczenie chorób zwyrodnieniowych układu nerwowego oraz uszkodzeń mózgu związanych z udarami to główne, nierozwiązane problemy współczesnej medycyny. Pomimo postępu w zrozumieniu molekularnego podłoża uszkodzeń komórek nerwowych oraz mechanizmów neuroprotekcji, skuteczność farmakoterapii udaru mózgu i chorób neurodegeneracyjnych nie jest zadowalająca. Jednym z istotnych ograniczeń w dotychczasowym leczeniu powyższych schorzeń jest nieefektywne dostarczanie leków o potencjalnym działaniu neuroprotekcijnym do uszkodzonego obszaru mózgowia.

Głównym celem projektu NanoNeucar jest opracowanie nowej strategii dostarczania leków o działaniu neuroprotekcijnym przy pomocy nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, a zarazem nie wykazujących negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie.

W trakcie realizacji projektu zostaną przebadane różne metodologie enkapsulacji aktywnych składników i tworzenia nanonośników o rozmiarach w zakresie 10-150 nm. W badaniach modelowych *in vitro* oraz *in vivo* określona zostanie możliwość ich przenikania przez barierę krew-mózg oraz skuteczność w zapobieganiu uszkodzeń komórek nerwowych. Ostatecznym celem projektu jest opracowanie nowych systemów podawania leków, które mogą w przyszłości znaleźć zastosowanie przy leczeniu udarów mózgu i chorób neurodegeneracyjnych np. choroby Alzheimera, Parkinsona lub schizofrenii.

Projekt realizowany jest przez konsorcjum naukowe, w którego skład wchodzi trzy instytucje polskie: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, Instytut Farmakologii PAN i Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ oraz dwie norweskie: SINTEF Materials and Chemistry (SINTEF) oraz Laboratory of Molecular Neuroscience (LMN) Uniwersytetu w Oslo.



2. FUNCLAY Synthesis and Functionality of Innovative Porous Clay Hybrid Nanostructures

Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej Pol-Nor/210445/53/2013 FUNCLAY (small grant) [2013-2015]

(kierownik projektu: dr Małgorzata Zimowska)

Metaliczne nanocząstki lub ich tlenki odgrywają ważną rolę w katalizie, optyce lub zastosowaniach biomedycznych. Dlatego ważne jest zastosowanie odpowiednich nanostrukturalnych nośników umożliwiającą dyspersję oraz dostępność aktywnych nanocząstek. Obiecującą grupą materiałów nośnikowych stosują nano-modyfikowane minerały ilaste, które pozwalają na kierunkowe, selektywne wprowadzanie heteroatomów w strukturę.

Celem projektu jest opracowanie metody otrzymywania innowacyjnych nanohybrydowych katalizatorów na podstawie bezpiecznych dla środowiska minerałów ilastych do całkowitego spalania lotnych zanieczyszczeń organicznych. Badania skupią się na kierunkowej funkcjonalizacji czysto krzemionkowych materiałów mezoporowatych i kompozytów powstałych na bazie warstwowych minerałów ilastych z grupy smektytów.

Funkcjonalizacja zostanie przeprowadzona poprzez selektywny dobór miejsca wprowadzenia heteroatomu w strukturę ilastego kompozytu.

Wpływ funkcjonalizacji porowatych heterostruktur ilastych na aktywność katalityczną zostanie zweryfikowany w reakcji dekompozycji etanolu oraz w reakcji usuwania lotnych związków organicznych z gazów wylotowych, których reprezentantem jest toluen. Miejsce wprowadzenia żelaza, możliwe zmiany w koordynacji oraz stopniu utlenienia zachodzące podczas syntezy oraz w warunkach reakcji katalitycznej zostaną określone z zastosowaniem metod spektroskopii Mössbauera oraz spektroskopii w FTIR.

PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE

1. MPD Krakow Interdisciplinary PhD Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures



PO IG 1.1.2. [2008-2012] MPD

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Projekt „Krakow Interdisciplinary PhD-Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures” był realizowany w ramach Międzynarodowych Projektów Doktoranckich (MPD) koordynowanych przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej i finansowanych w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka, Priorytet 1. Badania i rozwój nowoczesnych technologii, Działanie 1.2 Wzmocnienie potencjału kadrowego nauki. Projekt jest koordynowany przez dr hab. Bartłomieja Szafrana z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej, w Krakowie, który jest partnerem w Projekcie. W Projekcie uczestniczą również jednostki zagraniczne: Universiteit Antwerpen (Belgia), University of Leeds (Wielka Brytania), National Research Centre INFM-CNR (Włochy), University of Stockholm (Szwecja), Max Plank Institute für Molekulare Pflanzenphysiologie (Niemcy), Max Plank Instytut für Kolloid und Grenzflächenforschung (Niemcy), Basque Country University (Hiszpania), SINTEF Materia land Chemistry (Norwegia), VŠB-Technical University of Ostrava (Czechy), Institute of Physical Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences (Bułgaria).

Pięcioletni projekt był prowadzony od 1 listopada 2008 r. do 31 grudnia 2013 r., a jego celem było zrealizowanie 12 prac doktorskich w ramach 12 indywidualnych projektów naukowych. Rekrutacja doktorantów odbyła się w drodze otwartych konkursów. Projekt został zrealizowany zgodnie z planem i harmonogramem i zaowocował ze strony Instytutu pięcioma obronionymi pracami doktorskimi:

1. dr Anna Wójcik (promotor: dr hab. Tomasz Borowski, prof. IKiFP) "Selected iron-dependent dioxygenases as examples of biological nanostructures: computer modeling of catalytic activity". Publiczna obrona pracy doktorskiej odbyła się dnia 4 października 2013 r.
2. dr inż. Małgorzata Adamczak (promotor: prof. Piotr Warszyński) "Surfactants, polyelectrolytes and nanoparticles as building blocks for surface nanostructures". Publiczna obrona pracy doktorskiej odbyła się 30 września 2013 r.
3. dr inż. Dominik Kosior (promotor: prof. Kazimierz Małysa) "Nanostructures and stability of thin liquid layers". Publiczna obrona pracy doktorskiej odbyła się 10 października 2013 r. Praca została wyróżniona.
4. dr inż. Katarzyna Luberda-Durnaś (promotor: prof. Wiesław Łasocha) "Hybrid organic-inorganic layered materials - precursors of semiconducting nanostructures". Publiczna obrona pracy doktorskiej odbyła się 30 września 2013 r.
5. dr inż. Ewa Młyńczak (promotor: prof. Józef Korecki) "Surface and interface properties of metal-oxide magnetic nanostructures". Publiczna obrona pracy doktorskiej odbyła się 24 września 2013 r. Praca została wyróżniona. Praca miała formę czterech artykułów opublikowanych w recenzowanych czasopismach z listy filadelfijskiej.

Ponadto w 2013 r. doktoranci byli współautorami ośmiu publikacji w czasopismach notowanych w bazie Web of Science.

2. ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości

PO KL 4.1.1. [2009-2015] ISD

(kierownik projektu: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP)

Projekt realizowany w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki, koordynowany jest przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH we współpracy z IKiFP PAN i Instytutem Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN w Krakowie.

Zadania naukowe realizowane w ramach ISD obejmują fizyczne, chemiczne i technologiczne aspekty wiedzy o materiałach oraz nowoczesnej energetyki. Projekt realizowany jest od 2009 roku. W chwili obecnej w jednostkach partnerskich studiuje 60 doktorantów (1 rok -14 osób, 2 rok - 24 osoby, 3 rok - 22 osoby).

W roku 2013 w Instytucie realizowanych było 17 prac doktorskich:

II/III rok

K.Kubiak (promotor: prof. Z.Adamczyk) "Stabilność monowarstw nanocząstek srebra na powierzchniach granicznych-badania AFM i QCM"; Ł.Kuterasiński (promotor: dr hab. M.Derewiński prof. IKiFP) "Natura protonowych centrów kwasowych w zeolitach typu MFI podstawionych izomorficznie borem"; M.Gackowski (promotor: dr hab. M.Derewiński prof. IKiFP) "Monolity krzemionkowe z naniesionymi nanocząsteczkami zeolitu jako modelowe mikroreaktory przepływowe".

III/IV rok

P.Batys (promotor: dr hab. P.Weroński: prof. IKiFP) "Właściwości powierzchni nanocząstek i mechanizm ich transportu w układach wielowarstwowych"; A.Dziedzicka (promotor: prof. B.Sulikowski) "Modyfikowane zeolity jako katalizatory transformacji terpenów"; M.Grzesiak (promotor: prof. W.Łasocha) "Struktury typu MOF - materiały dla katalizy i inżynierii krystalicznej"; Ż.Kalemba-Jaje (promotor: prof. A.Drelinkiewicz) "Trasnestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności stałych polimerowych katalizatorów kwasowych"; A.Mińczewska (promotor: dr hab. T.Borowski prof. IKiFP) "Badania nad strukturą i mechanizmem katalitycznego działania wybranych metaloenzymów niehemowych"; P.Niemiec (promotor: dr hab. R.Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP) "Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów"; A.Szymańska (promotor: prof. W.Łasocha) "Nowe polimetalany i peroksokompleksy jako materiały do zastosowań w katalizie, medycynie i przemyśle"; M.Tatko (promotor: dr hab. P.Nowak prof. IKiFP) "Nowe materiały na osnowie tlenków metali ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych ogniwach paliwowych".

IV/V rok

J.Dziedzic (promotor: prof. P.Warszyński) "Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami"; M.Krzak (promotor: dr hab. P.Nowak prof. IKiFP) "Wysokosprawne pokrycia antykorozyjne z materiałów kompozytowych na osnowie polimerów organicznych"; M.Nosek (promotor: dr hab. P.Weroński prof. IKiFP) "Analiza porowatości wielowarstwowych materiałów koloidalnych o kontrolowanej architekturze"; K.Onik (promotor: dr hab. M.Derewiński prof. IKiFP) "Nowe materiały hierarchiczne oparte na nanoklastarach zeolitów jako podstawa nowoczesnych układów katalitycznych"; A.Pajor-Świerzy (promotor: prof. P.Warszyński) "Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami".

M.Oćwieja (promotor: prof. Z.Adamczyk) zakończyła realizację projektu "Kinetyka tworzenia oraz struktura nanocząstek srebra na powierzchniach heterogenicznych" obroniła pracę doktorską z wyróżnieniem i otrzymała tytuł doktora nauk chemicznych.

3. BIOTRANSFORMACJE użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym

Zadanie 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych



PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE
(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

Zad. 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych

W ramach realizacji zadania 6 projektu Biotransformacje prowadzono badania nad dwoma systemami enzymatycznymi katalizującymi syntezę chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych: dehydrogenazą etylobenzenową (EBDH) i dehydrogenazą fenylotanolową (PEDH). W czwartym roku projektu głównym celem badań nad PEDH była optymalizacja warunków reaktorowych z wykorzystaniem całych komórek bakteryjnych jako biokatalizatora oraz zbadanie parametrów fizykochemicznych wpływających na konwersję końcową. Prowadzono również pracę nad przygotowaniem wdrożenia metody syntezy alkoholi z użyciem PEDH u partnera przemysłowego projektu.

Z kolei w przypadku EBDH skoncentrowano się głównie na modelowaniu mechanizmu reakcji dla para podstawionych fenoli i anilin oraz kontynuacji badań nad zastosowaniem immobilizowanego enzymu w warunkach reaktorowych do syntezy alkoholi innych niż (S)-1-fenylotanol.

W ramach modelowania reaktywności PEDH poszerzono bazę danych dotyczącą kinetyki reakcji enzymu z szeregiem pochodnych acetofenonu (tj. 4-Br, 4-OCH₃, 4-F, 4-NO₂, 4-Cl, 4-Ph, 4-Et, 4-OH, 4-mesylo pochodnymi) o układy o wyższym stężeniu początkowym (100 mM-300 mM). Podwyższenie stężenia początkowego miało na celu osiągnięcie równowagowego limitu konwersji dla poszczególnych substratów w celu zróżnicowania wpływu elektronowego podstawników na końcową konwersję. Wpływ elektronowy opisano za pomocą stałej Hammetta, zaś efekt termodynamiczny opisano za pomocą teoretycznie wyznaczonej stałej równowagi (ze standardowej entalpii swobodnej reakcji). Następnie zbudowano dwa typy modeli neuronowych – trójwarstwowy perceptron (MLP 5-3-1) oraz sieć o radialnych funkcjach bazowych (RBF 5-168-1). Sieć typu MLP wykazywała się niższą dokładnością predykcji ($R^2=0.96$) w porównaniu do sieci RBF ($R^2=0.99$) ale pozwalała na analityczną interpretację krzywych odpowiedzi, tj. zależności parametrów wejściowych (stałej Hammetta, log P, stężenia początkowego, stałej równowagi log K, oraz czasu reakcji) od stężenia produktu. Analiza tych krzywych potwierdziła, że podstawniki elektronowo-akceptorowe, stabilizujące stan przejściowy wpływają w przybliżeniu liniowo na zwiększenie konwersji, wykazały nieliniowy wpływ hydrofobowości oraz stałej równowagi na konwersję oraz wyznaczyły optimum stężenia początkowego (150-200 mM) dla najwyższej konwersji.

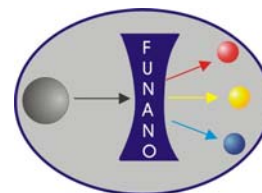
Zebrane doświadczenie ze zwiększania skali procesu pozwoliło opracować procedury wykorzystujące ekstrakty komórkowe jako biokatalizator i rozpoczęcie testowych reakcji w siedzibie partnera przemysłowego.

Badania dotyczące EBDH pokazały, że spadek enancjoselektywności obserwowany w przypadku para podstawionych alkilofenoli i alkiloanilin może mieć związek z alternatywnym mechanizmem reakcji. Ze względu na obecność zasady (zdeprotonowanej reszty karboksylowej Asp 485) w pobliżu podstawników -OH i -NH₂, karbokationowy produkt przejściowy może podlegać spontanicznemu przekształceniu do formy chinonowej/iminowej na skutek przekazania protonu. Tak stabilizowany produkt przejściowy może nie-stereospecyficzne, na drodze konkurencyjnej ścieżki reakcji, reagować z cząsteczką wody obecną w centrum aktywnym dając w rezultacie oba izomery optyczne. W zależności od wzajemnej szybkości enancjoselektywnej hydroksylacji przez grupę Mo-OH oraz nie-enancjoselektywnej hydroksylacji przez cząsteczkę wody powstaje mieszanina obu izomerów S i R o różnych proporcjach. Teoretyczną możliwość

zachodzenia reakcji wg. tego mechanizmu zweryfikowano badając wpływ pH na enancjoselektywność procesu. Wykazano, że wraz z podniesieniem pH wzrasta enancjoselektywność hydroksylacji.

Ponadto przebadano hydroksylację 2-etylotiofenu z wykorzystaniem stechiometrycznych reaktorów wykorzystujących immobilizowany enzym oraz $K_3[Fe(CN)_6]$ jako alternatywny akceptor elektronowy. Reakcje prowadzone w optymalnych warunkach pozwoliły na uzyskanie stężenia produktu rzędu 0.5 g/l.

4. FUNANO: Funkcjonalne nano i mikrocząsteczki - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach



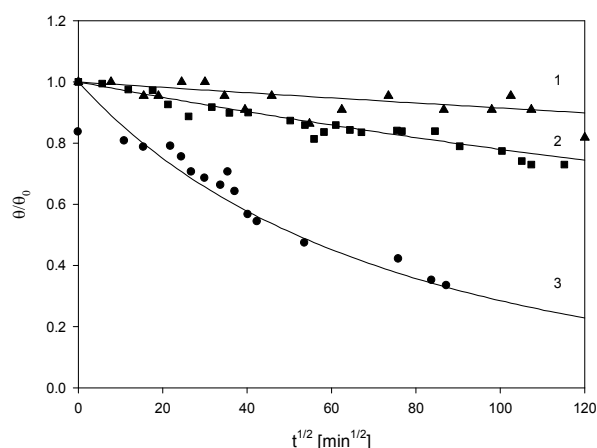
POIG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Przeprowadzono systematyczne badania adsorpcji i desorpcji nanocząstek srebra w warunkach transport dyfuzyjnego z powierzchni miki modyfikowanej kationowym polielektrolitem (PAH). Pokrycie cząstek, wyznaczone w sposób ilościowy przy pomocy technik AFM i SEM, regulowano w szerokim zakresie przez zmianę czasu adsorpcji, stężenia objętościowego suspensji oraz siły jonowej. Stabilność uzyskanych w ten sposób filmów nanocząstek srebra była określana w odrębnych pomiarach desorpcji (uwalniania) przeprowadzonych w warunkach dyfuzyjnych w długich okresach czasu do 240 godzin. Zmiany stopnia pokrycia w funkcji czasu określano przez bezpośrednie zliczenia ilości cząstek na mikrofotografiach SEM i AFM analizowanych przy użyciu oprogramowania specjalistycznego. Pomiarzy te umożliwiły wyznaczenie wpływu siły jonowej suspensji, temperatury oraz rozmiarów cząstek na kinetykę ich desorpcji. Przykładowe przebiegi kinetyki desorpcji uzyskane dla cząstek o rozmiarach 15, 28 i 54 nm są pokazane na Rys. 1. Jak można zauważyć, szybkość desorpcji maleje dosyć znacząco z rozmiarami cząstek. Tak więc, dla cząstek o rozmiarach 15 nm końcowe pokrycie po czasie 240 godzin stanowi jedynie 30% pokrycia początkowego, podczas gdy dla cząstek o rozmiarach 54 nm pokrycie końcowe po czasie 240 godzin pozostaje na poziomie 90% pokrycia początkowego.

Wyniki te były interpretowane przy pomocy modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji (RSA), co umożliwiło wyznaczenie równowagowych stałych adsorpcji K_a oraz energii wiązania. Dla cząstek o rozmiarach 15 nm ($T = 298$ K) wyznaczona w ten sposób energia wiązania zmieniała się w zakresie od -16.9 do -18.8 kT (dla siły jonowej 0,1 oraz 10^{-4} M). Dla cząstek o rozmiarach 54 nm wartości te wynoszą odpowiednio -17,7 oraz -20,8 kT.

Przeprowadzone badania wykazały, że możliwe jest sterowanie w kontrolowany sposób procesami uwalniania nanocząstek srebra, co może mieć istotne znaczenie w perspektywie antybakteryjnych zastosowań filmów srebra.



Rysunek 1. Kinetyka desorpcji nanocząstek srebra wyrażona jako zależność θ/θ_0 od $t^{1/2}$, (gdzie $\theta_0 = 0.05$ jest początkowym pokryciem). Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane przy pomocy metody AFM dla siły jonowej 10^{-2} M, pH 6, $T = 298$ K oraz różnych rozmiarów cząstek: 1) (\blacktriangle) 54 nm, 2) (\blacksquare) 28 nm, 3) (\bullet) 15 nm. Linie ciągłe oznaczają wyniki teoretyczne obliczone przy użyciu modelu RSA.



5. VOX Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych

PO IG 2.1.1. [2009-2013] VOX

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska,

główny wykonawca: dr Tadeusz Machej)

Celem projektu było opracowanie technologii otrzymywania skutecznych i niedrogich katalizatorów tlenkowych do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych z toksycznych gazów i par organicznych. Formuły katalizatorów projektowane były w oparciu o koncepcję wykorzystania właściwości syntetycznych minerałów warstwowych, izomorficznych z hydrotalkitem, o ogólnym wzorze $[(M^{2+})_{1-x}(M^{3+})_x(OH)_2](A^{n-})_{x/n} \cdot m H_2O$, których specyficzna struktura pozwala na wymieszanie aktywnych katalitycznie pierwiastków na poziomie atomowym.

W roku 2013 projekt wszedł w końcową fazę realizacji. Działania koncentrowały się na przeprowadzeniu ostatniego etapu prac doświadczalnych, polegającego na syntezie dużych ilości fazy aktywnej w celu wytworzeniu czterech 50-kilogramowych szarż katalizatora monolitycznego przeznaczonego do testów w skali półtechnicznej, oraz przeprowadzeniu testów katalitycznych w instalacji pilotowej. Do przygotowania fazy aktywnej wyselekcjonowano, na podstawie prac prowadzonych w poprzednich etapach projektu, dwie receptury (**1** i **2**), zawierające miedź i mangan jako główne składniki. W IKiFP PAN przygotowano 50 dm³ zawiesiny pokrywającej zawierającej fazę aktywną wg receptury **1** i 37 dm³ zawiesiny pokrywającej zawierającej fazę aktywną wg receptury **2**. Opracowano ponadto skład i procedurę przygotowania mieszaniny pokrywającej zawierającej jako główne składniki aktywną fazę tlenkową i lepiszcze. Nanoszenie mieszaniny pokrywającej na bloki monolitów kordierytowych o dwóch różnych wartościach cpsi oraz testy aktywności w instalacji pilotowej prowadziła firma Katalizator sp. z o.o..

Wyniki uzyskane w trakcie testów w skali półtechnicznej wykazały, że monolity przygotowane w oparciu o obie formuły fazy aktywnej są bardzo dobrymi katalizatorami całkowitego utleniania modelowych lotnych związków organicznych (toluen i etanol), osiągając dla stężenia 1g/m³ i obciążenia 10000 h⁻¹ wartości T₅₀ wynoszące dla toluenu 250°C a dla etanolu 180°C.

Uzyskane wyniki posłużyły do przygotowania dwóch zgłoszeń patentowych.

6. ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny

PO KL 4.1.1. [2010-2015] ISD MOLMED
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)



Projekt ISD "Nauki molekularne dla medycyny" jest realizowany w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki, Priorytet IV Szkolnictwo wyższe i nauka, Poddziałanie 4.1.1 Wzmocnienie potencjału dydaktycznego uczelni i jest współfinansowany z Europejskiego Funduszu Społecznego. Projekt jest koordynowany przez prof. Małgorzatę Witko IKiFP PAN. W projekcie uczestniczą następujące jednostki partnerskie: Wydział Chemii UJ, Wydział Lekarski UJ CM, Instytut Farmakologii PAN.

Pięcioletni projekt jest realizowany od 1 października 2010, a jego celem jest podniesienie jakości interdyscyplinarnego kształcenia na poziomie studiów doktoranckich w zakresie dziedzin: chemia, zaawansowane materiały, nanotechnologia, (bio)kataliza, chemia leków, farmakologia i medycyna przez otwarcie i realizację interdyscyplinarnych studiów doktoranckich. Jednocześnie równoległym celem jest zwiększenie potencjału dydaktycznego uczelni poprzez rozszerzenie i wzbogacenie oferty edukacyjnej na poziomie studiów III stopnia oraz podniesienie kompetencji dydaktycznych kadry akademickiej.

W 2013 roku w ramach projektu zrealizowano następujące zadania:

Zgodnie z programem ramowym studiów rozpoczęła się realizacja cyklu wykładów pn. „Filozofia”;

- W II kwartale ogłoszono i rozstrzygnięto konkurs na staże typu post-doc dla pracowników jednostek biorących udział w projekcie. W wyniku konkursu wyłoniono 4 osoby, które realizowały staże przez 3 miesiące;
- W II kwartale zorganizowano 5-dniowe wyjazdowe warsztaty naukowe dla doktorantów z udziałem zaproszonych wykładowców w Zakopanem;
- W IV kwartale zorganizowano 2-dniowe warsztaty naukowe dla doktorantów z udziałem zaproszonych wykładowców w IKiFP PAN;
- W IV kwartale zakończył się kurs języka angielskiego dla kadry naukowej w ramach podnoszenia jej kwalifikacji językowej. W kursie uczestniczyło 20 osób – pracowników jednostek partnerskich projektu.

W ramach ISD doktoranci prowadzą badania naukowe w jednostkach partnerskich, otrzymują miesięczne stypendia oraz dokonują zakupów materiałów niezbędnych do realizacji prac doktorskich. Ponadto biorą udział w konferencjach naukowych krajowych i zagranicznych, na których prezentują wyniki swoich badań w postaci wystąpień ustnych i posterów. Nad przebiegiem realizacji projektu czuwa Rada Programowa składająca się z 8 członków – po dwóch reprezentantów z każdej jednostki partnerskiej.

INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE

1. Organo-Clays as Intermediates for the Synthesis of Functional Hybrid Materials

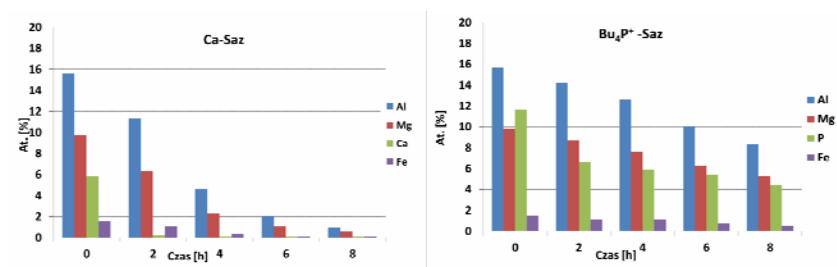
Projekt badawczy Polskiej Akademii Nauk i Słowackiej Akademii Nauk [2013-2015]
(kierownictwo projektu: dr Małgorzata Zimowska, dr Helena Pálková)

Minerały warstwowe z grupy smektytów występujące w formie naturalnej są cennymi i przyjaznymi dla środowiska materiałami wykorzystywanymi w różnych aplikacjach. Odpowiednia modyfikacja tych warstwowych krzemianów może zmienić ich właściwości oraz znacznie zwiększyć gamę możliwych zastosowań. Jedną z takich modyfikacji jest wprowadzenie w przestrzeń międzywarstwową kationów organicznych w miejsce naturalnie występujących kationów nieorganicznych kompensujących ujemny ładunek warstwy. W konsekwencji następuje zmiana właściwości powierzchniowych takich układów od hydrofilowych do coraz bardziej hydrofobowych, w zależności od wprowadzanego interkalatu. Minerały warstwowe poddawane są także aktywacji kwasowej, dzięki czemu zwiększają się ich właściwości kwasowe, modyfikacji ulega ich struktura i powierzchnia właściwa, co ma duże znaczenie w katalizie.

Celem badań było otrzymanie organicznej pochodnej warstwowego krzemianu poprzez wprowadzenie na drodze wymiany kationowej w miejsce jonów wapniowych montmorillonitu Ca-Saz dużych kationów tetrabutylfosfoniowych (Bu_4P^+). Działania skupiły się na określeniu wpływu obecności organicznego kationu tetrabutylfosfoniowego (Bu_4P^+) wprowadzonego w przestrzeń międzywarstwową minerału na stabilność struktury podczas traktowania jej kwasem (6 M HCl) w temperaturze 80°C przez 2-8 godzin.

Aktywacja kwasowa wpłynęła na strukturę oraz właściwości teksturalne zarówno wapniowej jak i organicznej pochodnej montmorillonitu. Wymiana jonów wapnia na protony w montmorillonicie Ca-Saz widoczna była już po 2 godzinach traktowania kwasem. Równocześnie nastąpiło stopniowe wymywanie atomów centralnych (Al i Mg) z warstw oktaedrycznych. Analiza EDS wykazała spadek ilości Al i Mg w Ca-Saz poniżej 10% wartości początkowej po 8h traktowania 6M HCl. Rozkład struktury spowodował również wzrost powierzchni właściwej z $70 \text{ m}^2/\text{g}$ dla Ca-Saz do $467 \text{ m}^2/\text{g}$ po 4h traktowania Ca-Saz kwasem, co związane było z tworzeniem amorficznej, częściowo sprotonowanej krzemionki. Wprowadzenie kationu Bu_4P^+ spowodowało spadek powierzchni właściwej z $70 \text{ m}^2/\text{g}$ dla Ca-Saz do $45 \text{ m}^2/\text{g}$ dla jej organicznej pochodnej. Traktowanie kwasem organicznej pochodnej Bu_4P^+ -Saz spowodowało stopniowe wymywanie Al i Mg z warstw oktaedrycznych oraz wzrost powierzchni właściwej. Warto jednak zauważyć, że te procesy zachodziły w dużo mniejszym stopniu w materiale będącym organiczną pochodną krzemianu warstwowego niż w materiale nie modyfikowanym wprowadzeniem kationów Bu_4P^+ . Zawartość początkowej ilości Al i Mg w strukturze po 8h traktowania kwasem zmniejszyła się tylko o ok. 50%. Obserwowano także powolną de-interkalację organicznego kationu, na co wskazuje spadek zawartości fosforu w układzie. Powierzchnia właściwa organicznej pochodnej (Bu_4P^+ -Saz), po 8h traktowania HCl uległa zwiększeniu do $244 \text{ m}^2/\text{g}$, zatem wzrost ten był mniejszy niż w przypadku Ca-Saz. Mniejszy stopień dekompozycji Bu_4P^+ -Saz wskazuje na większą stabilność struktury interkalowanego krzemianu. Stopień rozkładu warstw minerału zależy od dostępności wewnętrznych i zewnętrznych powierzchni dla protonów kwasu. Wprowadzone kationy Bu_4P^+ utrudniły więc atak protonów i poprawiły stabilność chemiczną minerału.

Rysunek 1. Zawartość Al i Mg w Ca-Saz i Bu_4P^+ -Saz po aktywacji kwasem.



2. Polyoxometalates Immobilized on Mesoporous Silicas for Selective Oxidation of Alkanes and Alkenes

Projekt badawczy Polskiej Akademii Nauk i Narodowej Akademii Nauk Ukrainy [2013-2014]
(kierownictwo projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, prof. Yuriy Zub)

Projekt dotyczy syntezy oraz określenia właściwości fizykochemicznych i katalitycznych hybrydowych materiałów łączących w sobie wielofunkcyjność katalityczną heteropolizwiązków z unikatową strukturą mezoporowatych krzemionek. Głównym celem jest opracowanie metody efektywnego wiązania heteropolizwiązku z powierzchnią mezoporowatej krzemionki i zastosowanie tak otrzymanych katalizatorów w reakcjach utleniania alkanów i alkenów w fazie ciekłej.

W okresie sprawozdawczym badano immobilizację 12-molibdenofosforowego anionu Keggina na powierzchni funkcjonalizowanej mezoporowatej krzemionki typu SBA-15. Funkcjonalizowany materiał SBA-15, zawierający powierzchniowe sprotonowane grupy 3-aminopropylowe, został otrzymany nową metodą typu „one-pot” opracowaną przez partnera ukraińskiego. Osadzanie heteropolianionów przeprowadzono metodą wymiany jonowej stosując wodny roztwór $H_3PMo_{12}O_{40}$. Katalizatory scharakteryzowano metodami XRD, analizy chemicznej, analizy termicznej, SEM, FTIR, oraz adsorpcji/desorpcji azotu w temperaturze $-196^{\circ}C$. Jako reakcję testową badającą właściwości kwasowe i redoksove hybrydowych katalizatorów heteropolianion/SBA-15 zastosowano katalityczny rozkład etanolu.

Badania właściwości fizykochemicznych otrzymanych materiałów potwierdziły, że mają one uporządkowaną strukturę porowatą typową dla układów SBA-15. Analiza chemiczna wykazała, że metoda wymiany anionowej pozwala na osadzenie do 15 % wag. anionu $PMo_{12}O_{40}^{3-}$. Katalityczny rozkład etanolu, przeprowadzony w zakresie temperatur $150-300^{\circ}C$ zarówno na próbkach hybrydowych, jak i na nie naniesionym $H_3PMo_{12}O_{40}$, wykazał, że immobilizacja anionów 12-molibdenofosforowych na powierzchni SBA-15 modyfikuje właściwości kwasowe i redoksove heteropolizwiązku. W preparatach naniesionych, w temperaturach $\leq 200^{\circ}C$, funkcja redoksova przeważa nad funkcją kwasową i głównym produktem reakcji jest aldehyd octowy. W wyższych temperaturach dominują właściwości kwasowe i katalizowany jest przede wszystkim proces odwodnienia etanolu do etylenu. Jego wydajność rośnie wraz z temperaturą, podczas gdy wydajność aldehydu octowego nie ulega większym zmianom. W temperaturze $300^{\circ}C$ wydajności etylenu i aldehydu octowego wynoszą, odpowiednio, około 50 i 20%. W przypadku referencyjnego nie naniesionego $H_3PMo_{12}O_{40}$, funkcja redoksova jest słabiej zaznaczona i powyżej $250^{\circ}C$ wydajność aldehydu octowego spada, aż do 0% w temperaturze $300^{\circ}C$, podczas gdy wydajność etylenu, odzwierciedlająca właściwości kwasowe katalizatora, gwałtownie rośnie, osiągając 100% w $300^{\circ}C$.

Wyniki badań posłużą jako podstawa do otrzymania aktywnych i selektywnych wielofunkcyjnych materiałów katalitycznych o programowanej porowatości oraz kontrolowanych właściwościach kwasowo-zasadowych i redoksowych.

INNE ZADANIA

1. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ



(dr Joanna Kryściak-Czerwenka, mgr Joanna Opalińska-Piskorz)

W 2013 roku zakres akredytacji laboratorium CezaŚ (AB 1221) obejmował pomiary 4 akredytowanymi metodami badawczymi. Ponadto wykonywano pomiary metodami badawczymi opracowanymi we współpracy z pozostałymi zespołami i grupami badawczymi Instytutu. W kwietniu laboratorium zostało poddane „ocenie na miejscu” (audit w nadzorze). W trakcie oceny stwierdzono 1 niezgodność z wymaganiami i 1 spostrzeżenie. Ustalono przyczyny niezgodności oraz zaplanowano i wdrożono odpowiednie działania korygujące, które zostały pozytywnie ocenione przez Polskie Centrum Akredytacji (PCA).

W omawianym okresie sprawozdawczym laboratorium CezaŚ zrealizowało:

1. 2 zlecenia z zakresu akredytowanego (oba z Instytutu). Zlecenia obejmowały pomiary:
 - stężenia i składu chemicznego zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych,
 - emisji gazowych zanieczyszczeń na terenie pracowni i laboratoriów Instytutu.
2. 15 zleceń wewnętrznych z IKiFP PAN, obejmujących 22 różnych serii pomiarowych (na 1654 próbkach) metodami:
 - chromatografii gazowej z detekcją masową,
 - spektroskopii w zakresie środkowej i bliskiej podczerwieni, z wykorzystaniem przystawek DRIFT i ATR oraz metodą transmisyjną,
 - chromatografii cieczowej z detekcją UV.

PCA, na wniosek Dyrektora Instytutu, od 1 października 2013 cofnęło akredytację laboratorium. Z dniem 2 grudnia 2013 roku rozwiązano Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska „CezaŚ”.

2. Węglowe ogniwa paliwowe z elektrolitem ze stopionych węglanów (DC-MCFC)

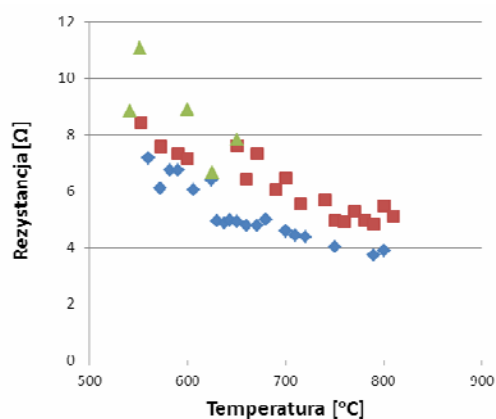
Prace badawcze dla Konsorcjum "Węglowe Ogniwa Paliwowe" Ministerstwa Gospodarki [2012-2013]

(kierownik projektu: dr inż. Grzegorz Mordarski)

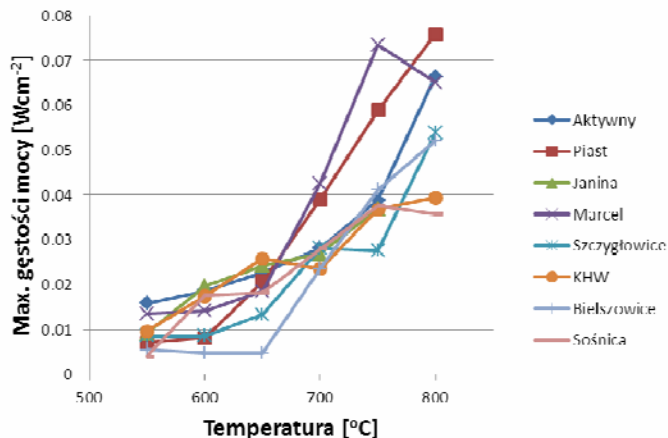
Węglowe ogniwo paliwowe (DCFC) przekształca z wysoką sprawnością energię chemiczną zawartą w węglu bezpośrednio w energię elektryczną. Teoretyczna sprawność ogniwa DCFC jest większa od 100 % za sprawą dodatniej zmiany entropii reakcji $C + O_2 = CO_2$ zachodzącej w ogniwie.

Paliwem do wysokotemperaturowych ogniw paliwowych mogą być: węglowodory, wodór lub węgiel. W węglowym ogniwie paliwowym paliwem jest węgiel stały, który w porównaniu do wodoru ma wiele zalet. Jest wygodniejszy w magazynowaniu i transporcie. Stwarza mniejsze zagrożenie wybuchu. Prawie wszystkie materiały bogate w węgiel pierwiastkowy takie jak: węgle kopalne, gaz ziemny, ropa naftowa, biomasa itp. łatwo mogą być przekształcone i oczyszczone na paliwo do DCFC.

Ze względu na rodzaj elektrolitu rozróżniamy kilka kategorii ogniwa DCFC. Jedną z nich jest DCFC oparte na elektrolicie ze stopionych węglanów (DC-MCFC). Ten typ ogniwa paliwowego był obiektem naszych badań. Nasze wysiłki w Etapie II „Testy wstępne” skierowane były na optymalizacji osiągnięć (gęstość prądu i gęstość mocy) małogabarytowego ogniwa paliwowego przez dobór: optymalnej temperatury pracy ogniwa, materiałów anodowych i katodowych, składu eutektyki węglanowej, składu i szybkości przepływu mieszaniny gazów anodowych i katodowych, katalizatorów, ilości i składu paliwa kompozytowego.



Rysunek 1. Rezystancje eutektyk węglanowych w funkcji temperatury.



Rysunek 2. Maksymalne gęstości mocy ogniw zasilanych węglami z polskich kopalń węgla kamiennego.

Końcowym efektem wykonanych prac było przeprowadzenie testów ogniwa z elektrolitem węglanowym zasilanych węglem pochodzącym z polskich kopalń. Węgły kamienne otrzymane z kopalń wstępnie zostały rozdrobnione i/lub oczyszczone. Testy ogniwa węglanowego z elektrolitem węglanowym przeprowadzone zostały dla węgla kamiennych pochodzących z: KWK "Piast", KWK "Janina", KWK "Marcel", KWK "Szczygłowice", KWK "Bielszowice" i KWK "Sośnica". Dla porównania zamieszczono testy ogniwa zasilanego węglem pierwiastkowym o wysokiej czystości (Węgiel Aktywny Norit® SX2 CZDA).

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2013

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. Z.Adamczyk, "Deposition", in: "Encyclopedia of Colloid and Interface Science" (T.Tadros, ed.), Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013, pp. 211-246 [ISBN 9783642206641]
2. Z.Adamczyk, "Diffusion of Particles", in: "Encyclopedia of Colloid and Interface Science" (T.Tadros, ed.), Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013, p. 247 [ISBN 9783642206641]
3. Z.Adamczyk, "Electrostatic Interactions" in: "Encyclopedia of Colloid and Interface Science" (T.Tadros, ed.), Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013, p. 362 [ISBN 9783642206641]
4. Z.Adamczyk, "Particle Transfer to Surfaces" in: "Encyclopedia of Colloid and Interface Science" (T.Tadros, ed.), Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013, p. 910 [ISBN 9783642206641]
5. Z.Adamczyk, "Specific Surface Interactions" in: "Encyclopedia of Colloid and Interface Science" (T.Tadros ed.), Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013, p. 1047 [ISBN 9783642206641]
6. Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, "Particle Deposition", in: "Encyclopedia of Colloid and Interface Science" (T.Tadros, ed.), Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013, pp. 868-910 [ISBN 9783642206641]
7. T.Borowski, E.Broclawik "Bioinorganic Reaction Mechanisms - Quantum Chemistry Approach", in: "Computational Methods to Study the Structure & Dynamics of Biomolecules" (A.Liwo, ed.), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg 2013, pp. 783-808
8. M.Radoń, E.Broclawik "Electronic Properties of Iron Sites and Their Active Forms in Porphyrin-Type Architectures", in: "Computational Methods to Study the Structure & Dynamics of Biomolecules" (A.Liwo, ed.), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg 2013, pp. 711-782
9. S.Stankov, T.Ślęzak, M.Zajac, M.Ślęzak, M.Sladecek, R.Röhlsberger, B.Sepiol, G.Vogl, N.Spiridis, J.Łażewski, K.Parliński, J.Korecki "In-situ ⁵⁷Fe Mössbauer Spectroscopy with Synchrotron Radiation on Thin Films", in "Mössbauer Spectroscopy. Applications in Chemistry, Biology, Industry, and Nanotechnology" (V.K.Sharma, G.Klingelhofer, T.Nishida, eds.), John Wiley & Sons 2013, pp. 3-42 [ISBN 978-1-118-05724-7]
10. M.Szaleniec, J.Szaleniec "Neuronowe modele przewidujące własności biomateriałów", in: "Inżynieria biomedyczna, podstawy i zastosowania, Sieci neuronowe w inżynierii biomedycznej", tom 9 (2013) p. 491-526
11. J.Szaleniec, J.Grabska-Chrzastowska, M.Szaleniec "Zastosowania sieci neuronowych w analizie przeżycia", in: "Inżynieria biomedyczna, podstawy i zastosowania, Sieci neuronowe w inżynierii biomedycznej", tom 9 (2013) p. 529-542

12. R.Tadeusiewicz, L.Rutkowski, M.Szaleniec, A.Horzyk, M.Strzelecki "Dodatek - kompedium sieci neuronowych", in: "Inżynieria biomedyczna, podstawy i zastosowania, Sieci neuronowe w inżynierii biomedycznej", tom 9 (2013) p. 667-745

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY JOURNAL CITATION REPORTS (LISTA A)

1. M.Adamczak, M.Krok, E.Pamuła, U.Posadowska, K.Szczepanowicz, J.Barbasz, P.Warszyński "Linseed Oil based Nanocapsules as Delivery System for Hydrophobic Quantum Dots", Colloid Surface B, 110 (2013) 1-7
2. M.Adamczak, G.Para, C.Simon, P.Warszyński "Natural Oil Nanoemulsions as Cores for Layer-by-Layer Encapsulation", J. Microencapsul., 30 (2013) 479-489
3. Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Nattich-Rak, M.Warsińska, G.Jagura-Burdzy, M.Adamczyk "Revealing Properties of the KfrA Plasmid Protein via Combined DLS, AFM and Electrokinetic Measurements", Colloid Surface B, 103 (2013) 635-641
4. Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska, A.Michna, K.Szczepaniak "Mechanisms of Nanoparticle and Bioparticle Deposition - Kinetic Aspects", Colloid Surface A, 439 (2013) 3-22
5. D.Babilas, K.Służalska, A.Krzakała, A.Maciej, R.P.Socha, G.Dercz, G.Tylko, J.Michalska, A.M.Osyczka, W.Simka "Plasma Electrolytic Oxidation of a Ti-15Mo Alloy in Silicate Solutions", Mater. Lett., 100 (2013) 252-256
6. K.Balin, A.Nowak, J.Szade, M.Wojtyniak, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, T.Gieła, J.Korecki, Z.Celiński "Magnetic Properties of Eu-Fe Thin Films", J. Appl. Phys., 113 (2013) 17E143
7. J.Balogh, I.Dézi, Cs.Fetzer, J.Korecki, A.Kozioł-Rachwał, E.Młyńczak, A.Nakanishi "Magnetic Properties of the Fe-MgO Interface Studied by Mössbauer Spectroscopy", Phys. Rev. B, 87 (2013) 174415
8. J.Barbasz, M.Cieśla "Domain Structure Created by Irreversible Adsorption of Dimers", Acta Phys. Polonica B, 44 (2013) 937-944
9. J.Barbasz, M.Cieśla, A.Michna "Competitive Adsorption of Bimodal Latex Suspension", Acta Phys. Pol. B, 44 (2013) 945-954
10. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido, J.-M.Krafft, S.Dźwigaj "BEA Zeolite Modified with Iron as Effective Catalyst for N₂O Decomposition and Selective Reduction of NO with Ammonia", Appl. Catal. B-Environ., 138-139 (2013) 434-445
11. A.Bratak-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Tuning Conformations of Fibrinogen Monolayers on Latex Particles by pH of Adsorption", Colloid Surface B, 103 (2013) 482-488
12. A.Bratak-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk, M.Cieśla "Human Fibrinogen Monolayers on Latex Particles: Role of Ionic Strength", Langmuir, 29 (2013) 3700-3710

13. Ł.Bratasz "Allowable Microclimatic Variations for Painted Wood", *Stud. Conserv.*, 58 (2013) 65-79
14. M.Cieśla, Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Wasilewska "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption at Solid Substrates at Lower pH", *Langmuir*, 29 (2013) 7005-7016
15. M.Cieśla, J.Barbasz "Random Sequential Adsorption of Trimers and Hexamers" *J. Mol. Model.*, 19 (2013) 5423-5427
16. M.Cieśla, J.Barbasz "Ordering in Fibrinogen Layers: A Numerical Study", *Colloid Surface B*, 110 (2013) 178-182
17. M.Cieśla, J.Barabsz "Random Packing of Spheres in Menger Sponge", *J. Chem. Phys.*, 138 (2013) 214704
18. M.Cieśla, J.Barbasz "Modelling of Interacting Dimer Adsorption", *Surf. Sci.*, 612 (2013) 24-30
19. A.Danelska, U.Ulkowska, R.P.Socha, M.Szafran "Surface Properties of Nanozirconia and Their Effect on Its Rheological Behaviour and Sinterability", *J. Eur. Ceram. Soc.*, 33 (2013) 1875-1883
20. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk, M.Kujda "Mechanism of HSA Adsorption on Mica Determined by Streaming Potential, AFM and XPS Measurements", *Colloid Surface B*, 101 (2013) 442-449
21. A.Drelinkiewicz, Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Zięba, J. Stejskal "Transesterification of Triacetin and Castor Oil with Methanol Catalysed by Supported Polyaniline-Sulfate. A Role of Polymer Morphology", *Appl. Catal. A-Gen.*, 455 (2013) 92-106
22. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Hydrogen Peroxide as Oxidant in Bio-mimetic Catalysis by Manganese Porphyrin. Theoretical DFT Studies", *Can. J. Chem.*, 91 (2013) 642-647
23. M.Dudek, M.Mosiąlek "Utility of $Ce_{0.8}M_{0.2}O_{1.9}$, $Ce_{0.8}M_{0.15}Y_{0.05}O_{1.9}$, $M=Gd, Sm$ Powders Synthesized by Aerosol Decomposition Method in Solid Oxide Fuel Cell Technology", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 339-347
24. M.Dudek, R.I.Tomov, C.Wang, B.A.Głowacki, P.Tomczyk, R.P.Socha, M.Mosiąlek "Feasibility of Direct Carbon Solid Oxide Fuels Cell (DC-SOFC) Fabrication by Inkjet Printing Technology", *Electrochim. Acta*, 105 (2013) 412-418
25. A.Dudzik, B.Kozik, M.Tataruch, A.Wójcik, D.Knack, T.Borowski, J.Heider, M.Witko, M.Szaleniec "The Reaction Mechanism of Chiral Hydroxylation of p-OH and p-NH₂ Substituted Compounds by Ethylbenzene Dehydrogenase", *Can. J. Chem.*, 91 (2013) 775-786
26. M.Elżbieciak-Wodka, P.Warszyński "Effect of Deposition Conditions on Thickness and Permeability of the Multilayer Films Formed from Natural Polyelectrolytes", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 348-357

27. U.Filek, D.Mucha, M.Hunger, B.Sulikowski "Novel Gallium and Indium Salts of the 12-Tungstophosphoric Acid: Synthesis, Characterization and Catalytic Properties", *Catal. Commun.*, 30 (2013) 19-22
28. K.Freindl, E.Partyka-Jankowska, W.Karaś, M.Zajac, E.Madej, N.Spiridis, M.Ślęzak, T.Ślęzak, D.Wisnios, J.Korecki "Oxygen on an Fe Monolayer on W(110): From Chemisorption to Oxidation", *Surf. Sci.*, 617 (2013) 183
29. M.Grzesiak-Nowak, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Synthesis and Investigations of New Strontium Dicarboxylates", *Z. Krist. – New Cryst. St.*, 228 (2013) 590-597
30. J.Gurgul, K.Łątka, I.Hnat, J.Rynkowski, S.Dźwigaj "Identification of Iron Species in FeSiBEA by DR UV-vis, XPS and Mössbauer Spectroscopy: Influence of the Fe Content", *Micropor. Mesopor. Mater.*, 168 (2013) 1-6
31. J.Gurgul, M.T.Rinke, I.Schellenberg, H.Eckert, R.Pöttgen "The Antimonide Oxides *REZnSbO* and *REMnSbO* (*RE*=Ce, Pr) - An XPS Study", *Solid State Sci.*, 17 (2013) 122-127
32. J.Handzlik, R.Gryboś, F.Tielens "Structure of Monomeric Chromium(VI) Oxide Species Supported on Silica: Periodic and Cluster DFT Studies", *J. Phys. Chem. C*, 117 (2013) 8138-8149
33. K.Hnida, R.Socha, G.Sulka "Polypyrrole-Silver Composite Nanowire Arrays by Cathodic Co-Deposition and Their Electrochemical Properties", *J. Phys. Chem. C*, 117 (2013) 19382-19392
34. B.Jachimska, M.Łapczynska, S.Zapotoczny "Reversible Swelling Process of 6th Generation Poly (amidoamine) (PAMAM) Dendrimers Molecule as Determined by Quartz Crystal Microbalance (QCM) Technique", *J. Phys. Chem. C*, 117 (2013) 1136-1145
35. H.Kazimierzczak, P.Ozga, R.P.Socha "Investigation of Electrochemical Co-Deposition of Zinc and Molybdenum from Citrate Solutions", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 378-390
36. H.Kazimierzczak, P.Ozga, Z.Świątek, E.Bielańska "Characterisation of Zn–Mo Alloy Layers Electrodeposited from Aqueous Citrate Solution", *J. Alloy Compd.*, 578 (2013) 82-89
37. D.H.Knack, J.L.Marshall, G.P.Harlow, A.Dudzik, M.Szaleniec, S-Y.Liu, J.Heider "BN/CC Isosteric Compounds as New Class of Enzyme Inhibitors: N- and B-Ethyl-1,2-azaborine Inhibit Ethylbenzene Hydroxylation as Non-Convertible Substrate Analogs", *Angew. Chem. Int. Edit.*, 52 (2013) 2599-2601
38. D.Kosior, J.Zawała, M.Krasowska, K.Małyśa "Influence of Surface Active Substances on Kinetics of the Bubble Attachment to Hydrophobic Surfaces", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 15 (2013) 2586-2595
39. R.Kosydar, M.Góral, A.Drelinkiewicz, J.Stejskal "Role of Polyaniline Morphology in Pd Particles Dispersion. Hydrogenation of Alkynes in the presence of Pd-Polyaniline Catalysts", *Chem. Pap.-Chem. Zvesti*, 67 (2013) 1087–1095

40. A.Kozioł-Rachwał, T.Giela, B.Matlak, K.Matlak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, M.Zajac, R.Rüffer, J.Korecki "Magnetism of Ultrathin Fe Films in MgO/Fe/MgO in Epitaxial Structures Probed by Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", *J. Appl. Phys.*, 113 (2013) 214309
41. A.Kozioł-Rachwał, W.Skowroński, T.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Przewoźnik, T.Stobiecki, Q.H.Qin, S.van Dijken, J. Korecki "Room-Temperature Perpendicular Magnetic Anisotropy of MgO/Fe/MgO Ultrathin Films", *J. Appl. Phys.*, 114 (2013) 224307
42. P.Kozyra, E.Broclawik, M.P.Mitoraj, J.Datka "C=C, C C, and C=O Bond Activation by Coinage Metal Cations in ZSM-5 Zeolites: Quantitative Charge Transfer Resolution", *J. Phys. Chem. C*, 117 (2013) 7511-7518
43. M.Krzan, H.Caps, N.Vandewalle "Stability of Bovine Serum Albumine foams in Hele-Shaw cell", *Colloid Surface A*, 438 (2013) 112-118
44. M.Kujda, Z.Adamczyk, G.Jagura-Burdzy, M.Adamczyk "KfrA Plasmid Protein Monolayers on Latex Particles-Electrokinetic Measurements", *Colloid Surface B*, 121 (2013) 165-170
45. M.Kujda, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, O.Bocheńska, G.Bras, A.Kozik, E.Bielańska, J.Barbasz "Antibacterial Properties of Charged-Sabilized Silver Nanoparticles", *FEBS Journal*, 280 (2013) 608-609
46. J.Kulbacka, M.Kotulska, N.Rembiałowska, A.Chromańska, I.Kamińska, A.Garbiec, J.Rossowska, M.Daczewska, B.Jachimska, J.Saczko, "Cellular Stress Induced by Photodynamic Reaction with CoTPPS and MnTMPyPCl5 in Combination with Electropoation in Human Colon Denocarcinoma Cell Lines (LoVo and LoVoDX)", *Cell Stress Chaperon.*, 18 (2013) 719-731
47. K.Luberda-Durnaś. D.Mucha, P.Sanz-Camacho, W.Łasocha "Synthesis and Characterization of Pillared Metal Sulfates (Diamine)MeSO₄, (Me = Zn, Cd)", *Z. Anorg. Allg. Chem.*, 639 (2013) 2195–2201
48. M.Lundberg, T.Borowski "Oxoferryl Species in Mononuclear non-Heme Iron enzymes: Biosynthesis, Properties and Reactivity from a Theoretical Perspective", *Coordin. Chem. Rev.* 257 (2013) 277-289
49. S.Łukasiewicz, E.Fic, K.Szczepanowicz, M.Bzowska, P.Warszyński, M. Dziejzicka-Wasylewska "Targeting of Encapsulated Clozapine Specifically at D2-5-HT2A Heteromer", *FEBS J.*, 280 (2013) 410-410
50. L.Matachowski, A.Drelinkiewicz, R.Rachwalik, M.Zimowska, D.Mucha, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Preparation and Characterization of Mesoporous Cs2HPW12O40 Aalt, Active in Transformation of m-Xylene", *Appl. Catal. A-Gen.*, 450C (2013) 19-27
51. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetics of Fluorescent Latex particle Deposition at Polyelectrolyte monolayers Determined by In situ Measurements", *Colloid Surface A*, 436 (2013) 237-244

52. P.Michorczyk, P.Kuśtrowski, A.Kolak, M.Zimowska "Ordered Mesoporous Ga₂O₃ and Ga₂O₃-Al₂O₃ Prepared by Nanocasting as Effective Catalysts for Propane Dehydrogenation in the Presence of CO₂", *Catal. Commun.*, 35 (2013) 95-100
53. A.Mińczewska, E.Broclawik, T.Borowski "On the Catalytic Mechanism of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase (HppE). A Hybrid DFT Study", *Chem.-Eur. J.*, 19 (2013) 771-781
54. E.Młyńczak, K.Freindl, N.Spiridis, J.Korecki "Epitaxial MgO/Fe(001) and Fe/MgO(001): Structures of the Interfaces", *J. Appl. Phys.*, 113 (2013) 024320
55. E.Młyńczak, P.Luches, S.Valeri, J.Korecki "NiO/Fe(001): Magnetic Anisotropy, Exchange Bias, and Interface Structure", *J. Appl. Phys.*, 113 (2013) 234315
56. E.Młyńczak, B.Matlak, A.Kozioł-Rachwał, J.Gurgul, N.Spiridis, J.Korecki "Fe/CoO(001) and Fe/CoO(111) Bilayers: Effect of Crystal Orientation on the Exchange Bias", *Phys. Rev. B*, 88 (2013) 085442
57. M.Morga, Z.Adamczyk "Monolayers of Cationic Polyelectrolytes on Mica - Electrokinetic studies", *J. Colloid Interf. Sci.*, 407 (2013) 196-204
58. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Stability of Silver Nanoparticle Monolayers Determined In situ by Streaming Potential Measurements", *J. Nanoparticle Res.*, 15 (2013) 2076-2090
59. M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, R.P.Socha, G.Mordarski, E.Bielańska, "Changes in the Morphology and the Composition of the Ag|Gd_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9} Interface Caused by Polarization", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 474-480
60. M.Mosiąlek, M.Dudek, J.Wojewoda-Budka "Composite La_{0.6}Sr_{0.4}CO_{0.8}Fe_{0.2}O₃/Ag Cathode for SOFCs with Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_{1.9} Electrolyte", *Archiv. Metallurgy Mater.*, 58 (2013) 275-281
61. M.Mosiąlek, M.Przybyła, M.Tatko, P.Nowak, M.Dudek, M.Zimowska "Composite La_{0.8}Sr_{0.2}MnO₃-d/Ag Cathode for SOFCs", *Archiv. Metallurgy Mater.*, 58 (2013) 1338-1340
62. M.Mosiąlek, M.Tatko, M.Dudek, E.Bielańska, G.Mordarski "Composite Ag-La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.8}Fe_{0.2}O₃ Cathode Material for Solid Oxide Fuel Cells, Preparation and Characteristic", *Archiv. Metallurgy Mater.*, 58 (2013) 1341-1345
63. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska, M Sadowska "Fibrinogen Monolayer Characterization by Colloid Depositon", *Langmuir*, 29 (2013) 11991 -12002
64. M.Nosek, P.Weroński, P.Nowak, J.Barbasz "Voltammetric Studies of Colloidal Particle Monolayer on a Gold Rotating Disk Electrode [Colloid Surface A, 403 (2012) 62-68]", *Colloid Surface A*, 429 (2013) 159-161
65. P.Nowak, M.Skompska, A.Więckowski "Preface - ISSIS 2012", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 337-338
66. M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Controlled Release of Silver Nanoparticles from Monolayers Deposited on PAH Covered Mica", *Langmuir*, 29 (2013) 3546-3555

67. M.Oćwieja, M.Morga, Z.Adamczyk "Self-Assembled Silver Nanoparticles on Mica - AFM, SEM, and Electrokinetic Characteristics", *J. Nanoparticle Res.*, 15 (2013) 1460-1474
68. M.Oszajca, L.Smrcok, W.Łasocha "Bis(4-Methylanilinium) and bis(4-Iodoanilinium) pentamolybdates from Laboratory X-Ray Powder Data and Total Energy Minimization", *Acta Crystallogr. C*, 69 (2013) 1367-1372
69. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, E.Bieleńska "Preparation and Characterization of the Electroactive Composites Containing Nickel Nanoparticles and Carbon nanotubes", *Electrochim. Acta*, 90 (2013) 563-572
70. A.Pacuła, R.P.Socha, M.Zimowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, P.Nowak "Application of As-Synthesized Co-Al Layered Double Hydroxides for the Preparation of the Electroactive Composites Containing N-Doped Carbon Nanotubes", *Appl. Clay Sci.*, 72 (2013) 163-174
71. K.Pamin, G.Pozzi, E.Tabor, W.Bukowski, J.Połtowicz "Oxidation of Cycloalkanes with Molecular Oxygen in the Presence of Salen Metallocomplexes in Thermomorphic Conditions", *Catal. Commun.*, 39 (2013) 102-105
72. T.Pańczyk, A.Jagusiak, G.Pastorin, W.H.Ang, J.Narkiewicz-Michałek "Molecular Dynamics Study of Cisplatin Release from Carbon Nanotubes Capped by Magnetic Nanoparticles", *J. Phys. Chem. C*, 117 (2013) 17327-17336
73. T.Pańczyk, W.Rudziński "Effects of Surface Heterogeneity of Carbon Nanotubes in Adsorption of Colloid Nanoparticles Studied by Means of Computer Simulations", *Adsorption*, 19 (2013) 611-618
74. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Leśkiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-Core and Polyelectrolyte-Shell Nanocapsules: Biocompatibility and Neuroprotection Against SH-SY5Y Cells", *J Nanoparticle Res.*, 15 (2013) 1-12
75. W.Płaziński "Equilibrium and Kinetic Modeling of Metal Ion Biosorption: On the Ways of Model Generalization for the Case of Multicomponent Systems", *Adsorption*, 19 (2013) 659-666
76. W.Płaziński "Binding of Heavy Metals by Algal Biosorbents. Theoretical Models of Kinetics, Equilibria and Thermodynamics", *Adv. Colloid Interf. Sci.*, 197-198 (2013) 58-67
77. W.Płaziński, M.Drach "Calcium- α -l-gulonate Complexes: Ca^{2+} Binding Modes from DFT-MD Simulations", *J. Phys. Chem. B*, 117 (2013) 12105-12112
78. W.Płaziński, J.Dziuba, W.Rudziński "Modeling of Sorption Kinetics: The Pseudo-Second Order Equation and the Sorbate Intraparticle Diffusivity", *Adsorption*, 19 (2013) 1055-1064
79. W.Płaziński, A.Knys-Dzieciuch "The 'Order-to-Disorder' Conformational Transition in CD44 Protein: An Umbrella Sampling Analysis", *J. Mol. Graph.*, 45 (2013) 122-127

80. P.Putaj, B.Gawel, W.Łasocha "Ethylenediamine as a Bridging Ligand: Structure Solution of Two Cadmium(II)-Based Coordination Polymers from Powder Diffraction Data", *Powder Diffr.* 28 (2013) 207-211
81. M.Radoń, P.Kozyra, A.Śtepniewski, J.Datka, E.Broclawik "Electronic Propensity of Cu(II) versus Cu(I) Sites in Zeolites to Activate NO - Spin- and Orbital-Resolved Cu–NO Electron Transfer", *Can. J. Chem.*, 91 (2013) 538-543
82. A.Rapacz-Kmita, E.Stodolak-Zych, M.Dudek, B.Szaraniec, A.Różycka, M.Mosiąlek, L.Mandecka-Kamiień "Degradation of Nanoclay-Filled Polylactide Composites", *Physicochem. Prob. Mineral Pro.*, 49 (2013) 91-99
83. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Metallobacteriochlorophylls as Potential Dual Agents for Photodynamic Therapy and Chemotherapy", *J. Mol. Model.*, 19 (2013) 4155-4161
84. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, L.Fiedor "Ligation of Water to Magnesium Chelates of Biological Importance", *J. Mol. Model.*, 19 (2013) 4661-4667
85. D.Rutkowska-Żbik, G.Mazur, A.Drzewiecka-Matuszek, Ł.Orzeł, G.Stochel "Exploring Novel Modified Vitamin B12 as a Drug Carrier: Forecast from DFT Modeling", *J. Phys. Chem. B*, 117 (2013) 9655–9661
86. M.Rybicki, I.Zasada, K.Freindl, N.Spiridis, J.Korecki "A LEED Study of Surface Relaxation in Fe(110) Epitaxial Film on W(110)", *Appl. Surf. Sci.*, 286 (2013) 66-70
87. W.Simka, R.Socha, G.Dercz, J.K.Michalska, A.Maciej, A.Krzakała "Anodic Oxidation of Ti-13Nb-13Zr Alloy in Silicate Solutions", *Appl. Surf. Sci.*, 279 (2013) 317-323
88. W.Simka, M.Sowa, R.P.Socha, A.Maciej, J.Michalska "Anodic Oxidation of Zirconium in Silicate Solutions", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 518-525
89. M.Sosnowska, M.Góral-Kurbiel, M.Skunik-Nuckowska, R.Jurczakowski, P.J.Kulesza "Hybrid Materials Utilizing Polyelectrolyte-Derivatized Carbon Nanotubes and Vanadium-Mixed Addenda Heteropolytungstate for Efficient Electrochemical Charging and Electrocatalysis", *J. Solid State Electr.*, 17 (2013) 1631-1640
90. M.Sowa, A.Kazek-Kęsik, R.P.Socha, G.Dercz, J.Michalska, W.Simka "Modification of Tantalum Surface via Plasma Electrolytic Oxidation in Silicate Solutions", *Electrochim. Acta*, 114 (2013) 627-636
91. V.Starinieri, D.C.Hughes, C.Gosselin, D.Wilk, K.Bayer "Pre-Hydration as a Technique for the Retardation of Roman Cement Mortars", *Cement Concrete Res.*, 46 (2013) 1-13
92. V.Starinieri, D.C.Hughes, D.Wilk "Influence of the Combination of Roman Cement and Lime as the Binder Phase in Render Mortars for Restoration", *Constr. Build. Mater.*, 44 (2013) 192-199
93. Z.Starowicz, M.Lipiński, K.Berent, R.Socha, K.Szczepanowicz, T.Kruk "Antireflection TiO_x Coating with Plasmonic Metal Nanoparticles for Silicon Solar Cells", *Plasmonics*, 8 (2013) 41-43

94. M.Strojecki, C.Colla, M Łukomski, E.Gabrielli "Kaiser Effect in Historic Timber Elements", *Eur. J. Wood Wood Prod.*, 71 (2013) 787-793
95. P.Szabelski, W.Rzysko, T.Pańczyk, E.Ghijsens, K.Tahara, Y.Tobe, S.De Feyter "Self-Assembly of Molecular Tripods in Two Dimensions: Structure and Thermodynamics from Computer Simulations", *RSC Adv.*, 3 (2013) 25159-25165
96. J.Szaleniec, M.Wiatr, M.Szaleniec, J.Składzień, J.Tomik, K.Oleś, R.Tadeusiewicz "Artificial Neural Network Modelling of the Results of Tympanoplasty in Chronic Suppurative Otitis Media Patients", *Comput. Biol. Med.*, 43 (2013) 16-22
97. M.Szaleniec, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko, P.Hejduk "Ammonium Adsorption on Brønsted Acidic Centers", *J. Mol. Model.*, 19 (2013) 4487-4501
98. A.Szymańska, W.Nitek, D.Mucha, R.Karcz, K.Pamin, J.Poltowicz, W.Łasocha "Structural Studies and Physico-Chemical Properties of New Oxodiperoxomolybdenum Complexes with Nicotinic Acid", *Polyhedron*, 60 (2013) 39-46
99. M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Freindl, W.Karaś, N.Spiridis, M.Zajac, A.I.Chumakov, S.Stankov, R.Rüffer, J.Korecki "Perpendicular Magnetic Anisotropy and Noncollinear Magnetic Structure in Ultrathin Fe Films on W(110)", *Phys. Rev. B*, 87 (2013) 134411-8
100. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, R.Zdyb, N.Spiridis, C.Quitmann, J.Raabe, N.Pilet, J.Korecki "X-Ray Photoemission Electron Microscopy Study of the In-Plane Spin Reorientation Transitions in Epitaxial Fe Films on W(110)", *J. Magn. Magn. Mater.*, 348 (2013) 101-106
101. T.Ślęzak, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, A.Kozioł-Rachwał, D.Wilgocka-Ślęzak, A.I.Chumakov, R.Rüffer, J.Korecki "Different Scenarios for the In-Plane Spin Reorientation Transition in Fe(110) Films on W(110)", *Phys. Rev. B*, 87 (2013) 094423
102. Z.Tabor, P.Nowak, M.Krzak, P.Warszyński "Effective Diffusivity in Transient State", *J. Chem. Phys.*, 139 (2013) 074903
103. U.D.Wdowik, P.Piekarz, K.Parliński, A.M.Oleś, J.Korecki "Strong Effects of Cation Vacancies on the Electronic and Dynamical Properties of FeO", *Phys. Rev. B*, 87 (2013) 121106
104. P.Weroński, M.Nosek, P.Batys "Limiting Diffusion Current at Rotating Disk Electrode with Dense Particle Layer", *J. Chem. Phys.* 139 (2013) 124705
105. D.Wilk, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Shrinkage Cracking in Roman Cement Pastes and Mortars", *Cement Concrete Res.*, 53 (2013) 168-175
106. K.A.Wilk, U.Bazylińska, J.Kulbacka, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "ROS-Induced Apoptosis of Human Melanoma Cells Using Biocompatible pPoyelectrolyte Nanocapsules as a cCarrier of Cyanine-Type Photosensitizer", *FEBS J.*, 280 (2013) 318-318

107. M.Wojnicki, K.Pačławski, R.Socha, K.Fitzner "Adsorption and Reduction of Platinum(IV) Chloride Complex Ions on Activated Carbon", *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, 23 (2013) 1147-1156
108. B.S.Wong, S.L.Yoong, A.Jagusiak, T.Pańczyk, H.K.Ho, W.H.Ang, G.Pastorin "Carbon Nanotubes for Delivery of Small Molecule Drugs", *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 65 (2013) 1964-2015
109. S.Wybraniec, K.Starzak, A.Skopińska, M.Szaleniec, J.Słupski, K.Mitka, P.Kowalski, T.Michałowski "Effects of Metal Cations on Betanin Stability in Aqueous-organic", *Food Sci. Biotechnol.*, 22 (2013) 353-363
110. J.Zawała, T.Dąbroś "Analysis of Energy Balance During Collision of an Air Bubble with a Solid Wall", *Phys. Fluids*, 25 (2013) 123101
111. J.Zawała, S.Dorbolo, N.Vandewalle, K.Małysa "Bubble Bouncing at Clean Water Surface", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 15 (2013) 17324
112. S.Zeng, W.Zhang, M.Śliwa, H.Su "Comparative Study of CeO₂/CuO and CuO/CeO₂ Catalysts on Catalytic Performance for Preferential CO Oxidation", *Int. J. Hydrogen Energ.*, 38 (2013) 3597-3605
113. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, K.Pamin, Z.Olejniczak, B.Gil, E.M.Serwicka "Laponite-Derived Porous Clay Heterostructures: III. The Effect of Alumination", *Micropor. Mesopor. Mater.* 175 (2013) 67-75
114. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Mechanisms of Human Fibrinogen Adsorption on Colloid Particles Determined by Electrokinetic and AFM Measurements", *FEBS J.*, 280 (2013) 159

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY MNiSW (LISTA B)

1. E.Bielańska, J.Camra, J.Dutkiewicz, P.Kornelak, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Oxidation of Acid-proof Steel Foil as a Method of Deposition of Phases Active in Nitrogen Oxides Decomposition on Metallic Monolith Walls", *Adv. Mater. Res.*, 651 (2013)
2. P.Panek, K.Drabczyk, R.P.Socha "Domieszkowanie donorowe Si ze źródła ciekłego do zastosowania w produkcji ciągłej ogniw słonecznych", *Elektronika*, 54 (2013) 88-90

POZOSTAŁE PUBLIKACJE NAUKOWE

1. A.Bielański "Pierwiastki chemiczne w kosmosie. Ich przemiany i rozpowszechnienie", *Niedziółki*, (2) (2013) 25-28
2. M.Dudek, P.Tomczyk, R.Socha, M.Skrzypkiewicz, J.Jewulski "Biomass Fuels for Direct Carbon Fuel Cell with Solid Oxide Electrolyte", *Int. J. Electrochem. Sci.*, 8 (2013) 3229-3253
3. J.Gurgul, M.T.Rinke, I.Schellenberg, R.Poettgen "The Antimonide Oxides LnZnSbO and LnMnSbO (Ln: Ce, Pr) - An XPS Study", *ChemInform*, 44 (2013)

4. D.H.Knack, J.L.Marshall, G.P.Harlow, A.Dudzik, M.Szaleniec, S-Y.Liu, J.Heider "BN/CC-isosterische Verbindungen als Enzyminhibitoren: Hemmung der Hydroxylierung von Ethylbenzol durch N - und B -Ethyl-1,2-aza- borin als nichtkonvertierbare Substratanaloga", *Angew. Chem.*, 125 (2013) 2660-2662
5. P.Kozyra, M.Świątek, J.Datka, E.Broclawik "Ag⁺ and Cu⁺ Cations Ligated by Zeolite Environment Enhancing Hydrogen Activation: ETS-NOCV Charge-Transfer Analysis", *J. Comp. Chem., Japan*, 12 (2013) 30-37
6. M.Krzan "Rheology of the Wet Surfactant Foams and Biofoams - A Review", *Technical Transactions*, 1-Ch (2013), 9-27
7. K.Proinsias, M.Giedyk, Ł.Banach, D.Rutkowska-Żbik, D.Gryko "Selectively Modified Cobyric Acid Derivatives", *Asian J. Org. Chem.*, 2 (2013) 504-513
8. J.Szaleniec, M.Szaleniec "Czekoladowa Chemia", *Charaktery - magazyn psychologiczny*, 04 (2013) 94-97
9. J.Waga, J.Zientarski, M.Szaleniec, K.Obtułowicz, W.Dyga, A.Skoczowski "Null Alleles in Gliadin Coding Loci and Wheat Allergenic Properties", *Am. J. Plant Sci.*, 4 (2013) 160-168

PUBLIKACJE OGŁOSZONE W FORMIE ELEKTRONICZNEJ

1. W.Barzyk, K.Lunkenheimer, P.Warszyński, B.Jachimska, A.Pomianowski "Effect of Molecular Structure of Amphiphiles on the Surface Pressure and Electric Surface Potential Isotherms at the Air/Solution interface", *Colloids Surf.*, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2013.11.051
2. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, B.Dembińska, P.J.Kulesza "The Effect of Nafion Ionomer on Electroactivity of Palladium-Polypyrrole Catalysts for Oxygen Reduction Reaction", *J Solid State Electrochem.*, DOI 10.1007/s10008-013-2299-5
3. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul "Palladium Content Effect on the Electrocatalytic Activity of Palladium-Polypyrrole Nanocomposite for Cathodic Reduction of Oxygen", *Electrocatal.*, DOI 10.1007/s12678-013-0155-0
4. D.Kosior, J.Zawała, R.Todorov, D.Exerowa, K.Małyśa "Bubble Bouncing and Stability of Liquid Films Formed under Dynamic and Static Conditions from n-Octanol solutions", *Colloids Surf. A*, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2013.11.022
5. M.Leżańska, A.Olejniczak, A.Paculea, G.Szymański, J.Włoch "The Influence of Microporosity Creation in Highly Mesoporous N-Containing Carbons Obtained from Chitosan on Their Catalytic and Electrochemical properties", *Catal. Today*, (2013), DOI:org/10.1016/j.cattod.2013.11.011
6. T.Machej, E.M.Serwicka, M.Zimowska, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, W.Rojek, R.Socha, "Cu/Mn-Based Mixed Oxides Derived from Hydrotalcite-Like Precursors as Catalysts for Methane Combustion", *Appl. Catal. A*, DOI: 10.1016/j.apcata.2013.07.048

7. M.Mosiąlek, P.Nowak, M.Dudek, G.Mordarski "Oxygen Reduction at the Silver|Gd_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9} Interface Studied by Electrochemical Impedance Spectroscopy and Cyclic Voltammetry at the Silver Point Electrode", *Electrochim. Acta*, DOI:10.1016/j.electacta.2013.12.071
8. M.Oszajca, A.Drzewiecka-Matuszek, A.Franke, D.Rutkowska-Żbik, M.Brindell, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik "Mechanistic Insight into Peroxo-Shunt Formation of Biomimetic Models for Compound II, Their Reactivity toward Organic Substrates and the Influence of N-Methylimidazole Axial Ligation", *Chem. Eur. J.*, DOI: 10.1002/chem.201303694
9. A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka, Piotr Warszyński "The Electroactive Multilayer Films of Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles and Their Application for H₂O₂ Sensors", *Colloid Polym. Sci.*, DOI 10.1007/s00396-013-3091-x
10. M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Polystyrene Latex Particles", *Langmuir*, DOI: 10.1021/la404046c
11. K.Sofińska, Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Nattich-Rak "Recombinant Albumin Monolayers on Latex Particles", *Langmuir*, DOI: 10.1021/la403715s
12. M.Sowa, A.Kazek-Kęsik, A.Krzakała, R.P.Socha, G.Dercz, J.Michalska, W.Simka "Modification of Niobium Surfaces Using Plasma Electrolytic Oxidation in Silicate Solutions", *J Solid State Electrochem.*, 2013 DOI: 10.1007/s10008-013-2341-7
13. M.Strojecki, M.Łukomski, L.Krzemień, J.Sobczyk, Ł.Bratasz "Acoustic Emission Monitoring of an Eighteenth-Century Wardrobe to Support a Strategy for Indoor Climate Management", *Stud Conserv.*, (2013), DOI 10.1179/2047058413Y.0000000096
14. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Air-Assisted Bubble Immobilization at Hydrophilic Porous Surface", *Surf. Innov.*, DOI: 10.1680/si.13.00031

PUBLIKACJE OGŁOSZONE Z ROKIEM WYDANIA 2014

1. Z.Adamczyk, M.Dąbkowska, M.Kujda, K.Sofińska "Human Serum Albumin Adsorption on Solid Substrates-Electrokinetic Studies", in: "Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology", CRC Group Taylor and Francis, Boca Raton 2014, Chapter 17, pp. 405-437 [ISBN 978-1-4665-6905-8]
2. U.Bubniene, M.Oćwieja, B.Bugelyte, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, J. oronovic, A.Ramanaviciene, A.Ramanavicius "Deposition of Fold Nanoparticles on Mica Modified by poly(Allylaminehydrochloride) Monolayers", *Colloids Surf. A*, 441 (2014) 204-210
3. A.Drelinkiewicz, Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, R.Kosydar "Organo-Sulfonic Acids Doped Polyaniline-Based Solid Acid Catalysts for the Formation of Bio-Esters in Transesterification and Esterification Reactions", *Fuel* 116 (2014) 760-771
4. J.Gurgul, K.Łątka, A.W.Pacyna, S.C.Peter, R.Pöttgen, "TbRhSn and DyRhSn - Detailed Magnetic and ¹¹⁹Sn Mössbauer Spectroscopic Studies", *Intermetallics*, 46 (2014) 56-64

5. E.Jamróz, G.Para, B.Jachimaska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A.Para "Albumin-Furcellarane Complexes as Cores for Nanoencapsulation", *Colloids Surf. A*, 441 (2014) 880-884
6. J.Koperski, T.Urbańczyk, M.Krośnicki, M.Strojecki "Free←Bound and Bound←Bound Profiles in Excitation Spectra of the $B^3 1 \leftarrow X^1 0^+$ Transition in CdNg (Ng=Noble Gas) Complexes", *Chem. Phys.*, 428 (2014) 43-52
7. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of n-Octanol on the Bubble Impact Velocity, Bouncing and the Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Solid Surfaces", *Colloids Surf. A*, 441 (2014) 788-795
8. K.Małyśa, R.Miller, P.Warszyński "Preface", *Colloids Surf. A*, 441 (2014) 787
9. L.Matachowski, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka "Efficient Dehydration of Ethanol on the Self-Organized Surface Layer of $H_3PW_{12}O_{40}$ Formed in the Acidic Potassium Tungstophosphates", *Appl. Catal. A*, 469 (2014) 290-299
10. L.Matachowski, A.Drelinkiewicz, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka, R.Rachwalik "Preparation of Active $CS_2HPW_{12}O_{40}$ Catalyst with the 'Core-Shell' Secondary Structure by Self-Organizing Process", *Appl. Catal. A*, 469 (2014) 239-249
11. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Formation of Oil Filled Nanocapsules with Silica Shells Modified by Sequential Adsorption of Polyelectrolytes". *Colloids Surf. Physicochem. Eng. Aspects*, 441 (2014) 885-889
12. J.Zawała, E.Małyśa, M.Krzan, K.Małyśa "Monitoring of Contamination of Environmental and Industrial Waters Using the Bubble Velocity Measurements - Advantages and Limitations", *Phys. Problem Mineral. Process.*, 50 (2014) 143-157

ARTYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. P.Batys "Structure and Transport Properties of Colloidal Multilayers", *Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013*, p. 13-16 [ISBN 978-83-925779-3-5]
2. J.Dziedzic "Studies on the Photocatalytic Degradation of the Humic Substances Supported by Chemical Oxidation", *Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013*, p. 119-122 [ISBN 978-83-925779-3-5]
3. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Modified, Natural Clinoptilolites from Slovakia and Mexico as Catalysts for Liquid-Phase Isomerization of α -Pinene", *Proceedings "Zeolites and Ordered Porous Materials: Bridging the Gap between Nanoscience and Technology", Moscow 2013*, vol. B, pp. 232-233
4. M.Gackowski "Deposition of Zeolite Nanoparticles onto Silica Monolith", *Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013*, p. 173 [ISBN 978-83-925779-3-5]

5. M.Grzesiak-Nowak "Metal-Organic Frameworks of Metals from s-block - New Barium and Strontium Dicarboxylates", Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 197 [ISBN 978-83-925779-3-5]
6. A.Klimek, J.Dziadkowiec, M.Rogowska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, A.Gaweł, E.M.Serwicka, K.Bahranowski "Delaminacja kationowych i anionowych form minerałów warstwowych", in: "Sorbenty Mineralne (Surowce, Energetyka, Ochrona Środowiska, Nowoczesne Technologie)", Wydawnictwa AGH, Kraków 2013, pp. 201-214 [ISBN 978-83-7464-629-1]
7. M.Kolasińska-Sojka, A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Electroactive Properties of the Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", MATEC Web of Conferences 4 (2013) 01003
8. M.Krzak "Anticorrosive Polymer Coatings with Water Barrier Properties Improved by Water Traps Addition", Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 139-142 [ISBN 978-83-925779-3-5]
9. Ł.Kuterasiński "On the Nature of Brønsted Acid Sites Generated in MFI Type of Zeolite Isomorphously Substituted with Boron", Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 143 [ISBN 978-83-925779-3-5]
10. M.Łukomski, J.Czop, M.Strojecki, Ł.Bratasz "Acoustic Emission Monitoring: On the Path to Rational Strategies for Collection Care", Postprints of the Munich Climate Conference 'Climate for Collections-Standards and Uncertainties 2012' (J.Ashley-Smith, A.Burmester, M.Eibl (eds.), Munich 2013
11. M.Łukomski, L.Krzemień "Automated Analysis of Art Object Surfaces Using Time-Averaged Digital Speckle Pattern Interferometry", Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering, 8790 (2013) paper 87900Y
12. E.Małyśa, J.Zawała, K.Małyśa "A Sensitive and Simple Method for Controlling Concentration of Flotation Reagents in Waters of the Coal Processing Plants", Proceedings. 17th Int. Coal Preparation Congr. Istanbul 2013, pp. 387-392
13. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Physicochemical Properties of Modified Cu-HPA: Influence of Cu Position in Keggin Anion", Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 29-32 [ISBN 978-83-925779-3-5]
14. M.Nosek "Cyclic Voltammetry Method for Examining Ion Transport Through Porous Layer", Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 151-154 [ISBN 978-83-925779-3-5]
15. K.Onik "Zeolite Seeds Precursors Incorporated in the Mesoporous Framework: Physicochemical and Catalytic Properties", Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 197 [ISBN 978-83-925779-3-5]
16. A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Electroactive Multilayer Films of Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles as a Sensitive Tool for H₂O₂ Detection", Proceedings ISD Workshops, Szczyrk 2013, p. 155-158 [ISBN 978-83-925779-3-5]

17. M.Strojecki, M.Łukomski, C.Colla, E.Gabrielli "Acoustic Emission as a Non-Destructive Method for Tracing Damage: From Laboratory Testing to Monitoring Historic Structures", in: *Nondestructive Testing of Materials and Structures* (O.Buyukozturk, M.A.Tasdemir, O.Gunes, Y.Akkaya, eds.), RILEM Bookseries Volume 6, Springer, Dordrecht 2013, pp. 1131-1136 [978-94-007-0722-1]
18. A.Szymańska "Structural and Physicochemical Studies of Molybdenum Oxo-Peroxo and Oxo Complexes", *Proceedings. ISD Workshops, Szczyrk 2013*, p. 197 [ISBN 978-83-925779-3-5]

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. M. Adamczak, E. Jarek, K. Szczepanowicz, C. Simon, P. Warszyński "Membrane emulsification as a method to form liquid core polyelectrolyte microcapsules", CD-ROM Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T1,P30
2. Z.Adamczyk "Mechanism and Kinetics of Nanoparticle and Protein Adsorption", Book of Materials. COST Action CM1101 WG2, WG3 & WG4 Meeting 'Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites', Szeged 2013, p. 16 [ISBN:978-963-306-220-3]
3. Z.Adamczyk "Nanoparticles and Proteins at Surfaces: Revealing Universal Adsorption Mechanisms", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sandomie 2013, p. 13
4. P.Batys, P.Weroński "Effect of Various Single-Layer Coverage on Nanoparticle Multilayer Properties", Book of Abstracts. 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013. p.42
5. P.Batys, P.Weroński "Controlling Structure and Surface Properties of LbL Multilayers", CD-ROM Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
6. P.Batys, P.Weroński "LbL Assemblies with Well-Defined Transport Properties - Numerical Studies", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 737
7. P.Batys, P.Weroński "Surface Properties of Particle Multilayers - Numerical Studies", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sandomie 2013, p. 15
8. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar "Supported Noble Metal Catalysts for Hydrodechlorination of Organic Compounds: from the Choice of Preparation Method to Catalytic Properties", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013*, p. 162 [ISBN 978-83-60514-18-4]
9. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T. Shishido, S.Dźwigaj "BEA Zeolite Modified with Iron as Effective Catalysts for N₂O Decomposition and Celective Reduction", ", Book of Abstracts. 23rd North American Catalysis Society Meeting, Louisville 2013
10. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido, S.Dźwigaj "Role of Isolated Mononuclear Iron in Decomposition of N₂O and SCR of NO with Ammonia", *Proceedings. 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013*, [ISBN 978-5-903391-97-4]

11. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido, J.-M.Krafft, S.Dźwigaj "SCR of NO with Ammonia on Fe-Containing Zeolite Catalysts", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne*, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 41 [ISBN 978-83-60514-18-4]
12. E.Broclawik, P.Kozyra, M.Radoń, A.Stępniewski, J.Datka "Electronic Propensity of Cu(II) / Cu(I) Sites in Zeolites to Activate NO: Spin- and Orbital-Resolved Cu–NO Electron Transfer", *Proceedings. 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013*, pp. 45-46 [ISBN 978-5-903391-97-4]
13. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Nitric Oxide as a non-Innocent Ligand in (Bio-)Inorganic Complexes: Charge Transfer Resolution", *Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013*, paper O11
14. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Tlenek azotu(II) jako „non-innocent” ligand w kompleksach (bio-)nieorganicznych: analiza kanałów przepływu ładunku", *Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013*, pp. 581-582 [ISBN 97883-60988-15-2]
15. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Czynniki elektronowe w aktywacji NO przez centra Cu(I) i Cu(II) w zeolitach", *Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013*, p. 600 [ISBN 97883-60988-15-2]
16. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń, P.Kozyra, J.Datka "Electronic Propensity of Cu(II) / Cu(I) Sites in Zeolites to Activate NO: Spin- and Orbital-Resolved Cu–NO Electron Transfer", *Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013*, paper P36
17. A.Czapla, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Sole glinowa, galowa i indowa heteropolikwasu H3PW12O40 jako katalizatory konwersji alkoholu etylowego w fazie gazowej", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013*, p. 68 [ISBN 978-83-60514-18-4]
18. K.Drabczyk, R.Socha, P.Panek, G.Mordarski "Electrodeposition of Thin Metallic Layer for Solar Cell Electrodes", *Book of Abstracts. 37th Int. Microelectronics and Packaging IMAPS-CPMT Poland Conf., Kraków 2013*, p. 153
19. A.Drelinkiewicz, Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Zięba, J.Stejskal "Transesterification of Triglycerides on Polyaniline Doped with Various Sulfonic Acids", *Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013*
20. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Oszajca, A.Franke, D.Rutkowska-Żbik, M.Brindell, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik "Theoretical Studies on Reactivity of Biomimetic Models for Compound II", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013*, p. 149 [ISBN 978-83-60514-18-4]
21. M.Dudek, M.Mosiąlek "Utility of Ce_{0.8}M_{0.2}O_{1.9}, Ce_{0.8}M_{0.15}Y_{0.05}O_{1.9}, M=Gd, Sm Powders Synthesized by Aerosol Decomposition Method in Solid Oxide Fuel Cell Technology", *Electrochim. Acta*, 104 (2013) 339-347

22. M.Dudek, R.I.Tomov, C.Wang, B.A.Głowacki, P.Tomeczyk, R.P.Socha, M.Mosiąlek "Feasibility of Direct Carbon Solid Oxide Fuels Cell (DC-SOFC) Fabrication by Inkjet Printing Technology", *Electrochim. Acta*, 105 (2013) 412-418
23. A.Dudzik, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, N.Zawada, J.Kryściak-Czerwenka, M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider "Asymmetric Reduction of Prochiral Ketones to Chiral Alcohols Catalyzed by (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013*, p. 122 [ISBN 978-83-60514-18-4]
24. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Zimowska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, E.Bielańska, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Hydrotalcite Derived Cu-Mn-Al Catalysts for Combustion of Volatile Organic Compounds - A Synergy Effect upon Ce and Zr Addition", *Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013*, paper 3-T8-244
25. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Zimowska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, E.Bielańska, R.P.Socha, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Katalizatory tlenkowe Cu-Mn-Al-O otrzymane z prekursorów typu hydrotalkitu – wpływ domieszek Ce i Zr na aktywność w reakcji całkowitego utleniania etanolu", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013*, p. 7 [ISBN 978-83-60514-18-4]
26. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz, A.Bukowska, W.Bukowski "Uwodornienie acetolu w obecności katalizatora rutenowego osadzonego na żywicy metakrylanowo-styrenowej", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013*, p. 74 [ISBN 978-83-60514-18-4]
27. J.Dutkiewicz, E.Bielańska, J.Camra, I.Dukla, P.Kornelak, M.Najbar, A.Weselucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Tworzenie katalitycznie aktywnych warstw tlenkowych przez utlenianie folii ze stali kwasoodpornej", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013*, p. 75 [ISBN 978-83-60514-18-4]
28. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Degradation of Industrial Dyes in Photocatalytic Process", *Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013*, p.
29. J.Dziedzic, K.Szczepanowicz, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic Decomposition of Organic Pollutants During the Simultaneous Application of TiO_2 and Oxidant", *Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013*, p. 205
30. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Liquid-Phase Transformation of Terpenes over Dealuminated Natural Clinoptilolite from Slovakia", *Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013*, p 74
31. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Naturalny, modyfikowany klinoptylolit jako katalizator w transformacji węglowodorów terpenowych", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013* p. 76 [ISBN 978-83-60514-18-4]

32. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Modified, Natural Clinoptilolites from Slovakia and Mexico as Catalysts for Liquid-Phase Isomerization of α -Pinene", Book of Abstracts 'Zeolites and Ordered Porous Materials: Bridging the Gap between Nanoscience and Technology', Moscow 2013, p. 74 [ISBN 978-5-903391-97-4]
33. S.Dźwigaj, J.-M.Krafft, P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido "SCR of NO with Ammonia and N₂O Decomposition on Fe-Single Site Zeolite Catalysts", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013, paper 2-T8-318
34. M.Gackowski, M.Derewiński "Osadzanie nanokryształów zeolitu MFI na powierzchni makroporów monolitów krzemionkowych", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 167 [ISBN 978-83-60514-18-4]
35. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, M.Derewiński, P.Warszyński "Deposition of Zeolite Nanoparticles onto Silica Monolith", e-book of abstracts. Int. Conf. on Advanced Complex Inorganic Nanomaterials ACIN 2013, Namur 2013, paper P-138
36. J.Gao, J.Handzlik, R.GryboS, J.-M.Jehng, I.E.Wachs, S.Podkolzin "Spectroscopic and Computational Study of Cr and Mo Oxide Nanostructures in ZSM-5 for Methane Dehydroaromatization", Book of Abstracts. 23rd North American Catalysis Society Meeting, Louisville 2013
37. M.Góra, B.Kozik, M.Nattich-Rak, K.Jamroży, M.Łuczyński "Application of Aqueous Solutions of Phosphates and Surfactants for Hydrothermal Biomass Pretreatment", Book of Abstracts. 4th Int. Environmental Best Practices Conf., Olsztyn 2013, p. 49
38. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, A.Drelinkiewicz, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul, E.Bielańska "A Metal Loading Effect on the Electrocatalytic Activity of Palladium - polyPyrrole Nanocomposite for Cathodic Reduction of Oxygen", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 77 [ISBN 978-83-60514-18-4]
39. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, A.Drelinkiewicz, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul, E.Bielańska "A Metal Loading Effect on the Electrocatalytic Activity of Palladium - Polypyrrole Nanocomposite for Cathodic Reduction of Oxygen", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013, paper 1-T5-290
40. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Modelowanie monomerów Cr, Mo i W na powierzchni amorficznej krzemionki periodyczną metodą DFT", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013 [ISBN 978-83-60514-18-4]
41. M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Krystalochemia związków kwasów dikarboksylowych z barem i strontem", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 168 [ISBN 978-83-60514-18-4]
42. M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania krystalochemiczne związków kwasów dikarboksylowych z barem i strontem", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013 [ISBN 978-83-906218-7-6]

43. M.Grzesiak-Nowak, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Crystallography of New Strontium Dicarboxylates", *Acta Cryst. A*, 69 (2013) 502
44. J.Handzlik, R.Gryboś, F.Tielens "Isolated Cr(VI) Oxide Species Supported on AlOx/SiO 2 - A Comparative Periodic and Cluster DFT Studies Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013 [ISBN 978-83-60514-18-4]
45. J.Hartwich, B.Jachimska, A.Marczakiewicz, W.Drozd, M.Ryś, A.Skoczowski "Molecular Imaging of Lipoprotein Phenotype by Dynamic Light Scattering. Clinical Applications", *Book of Abstracts. 6th Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS'2013, Łochów 2013*, p. 36
46. J.Heider, M.Szaleniec, D.Knack, K.Sündwoldt "Ethylbenzene Dehydrogenase and Related Enzymes: Mechanism and Functions", *Conference Materials. 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013*, p. 11
47. B.Jachimska "Bovine Serum Albumin (BSA) Conformation Investigated by Quartz Crystal Microbalance (QCM-D) Measurements, Surface Plasmon Resonance (MP-SPR) and Atomic Force Microscopy (AFM) Measurements on a Silica Surface", *Book of Abstracts. 6th Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS'2013, Łochów 2013*, p. 40
48. B.Jachimska "Structure of Adsorbed Dendrimer Monolayers Investigated by Combining QCM-D and MP-SPR Techniques", *Book of Abstracts. Int. SPR Workshop 'New Dimensions in Life Sciences', Kraków 2013*
49. A.Jagusiak, B.Piekarska, T.Pańczyk, P.Laidler "Badanie właściwości kompleksów nanorurek węglowych i związków typu czerwieni kongo jako potencjalnych układów celowanego dostarczania leków", *Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego*, 6 (I) (2013) 64
50. K.Jamroży, A.Michna, Z.Adamczyk "Kinetics of Fluorescent Latex Particle Deposition at PAH and PDADMAC Monolayers Determined by In situ Measurements", *Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013*, p. T8.P23
51. M.Jaworska, E.Sikora, K.Szczepanowicz, J.Ogonowski "Wpływ charakteru bazy emulsyjnej zawierającej kwas oleinowy na uwalnianie mentolu", *Książka Abstraktów. Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013*, p. P5.6 [ISBN 978-83-63503-12-3]
52. M.Jaworska, E.Sikora, K.Szczepanowicz, J.Ogonowski "Wpływ rodzaju surfaktanta na fizykochemiczne właściwości nanoemulsji na bazie kwasu oleinowego", *Książka Abstraktów. Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013*, p. P5.7 [ISBN 978-83-63503-12-3]
53. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz, E.Bielańska "Kwasowe sole polianiliny w produkcji estrów metylowych", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013*, p. 89 [ISBN 978-83-60514-18-4]

54. A.Karabas, M.Bzowska, J.Bereta, K.Szczepanowicz "In vitro Evaluation of Cytotoxic Effect of Polyelectrolyte Nanoparticles and Their Application as Drug Delivery System", Book of Abstracts. 15th National Academic Seminar of Biotechnology Students & 5th Int. Conf. of Biotechnology Student, Wroclaw 2013, p.64
55. A.Karabas, M.Bzowska, R.Mężyk-Kopeć, J.Bereta, K.Szczepanowicz "Analiza cytotoksyczności i przydatności cząstek jako system transportującego leki cytostatyczne", Book of Abstracts. Międzyuczelniane Symp. Biotechnologiczne 'Symbioza', Warszawa 2013, p.147 [ISBN 978-83-935107-3-3]
56. A.Karabas, M.Bzowska, R.Mężyk-Kopeć, J.Bereta, K.Szczepanowicz "In vitro Analysis of Cytotoxic Effect of Nanoparticles on Tumor Cells", Book of Abstracts. Student Scientific Conf. on Biotechnology and Biomedicine, Masaryk University, Brno 2013, p.142 [ISBN 978-80-210-6200-9]
57. R.Karcz, R.Dula, J.Maciejewska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.M.Serwicka "Aktywność katalityczna soli kobaltowych kwasu fosforowolframowego i fosfomolibdenowego w reakcji utleniania cyklooktanu nadtlaniem wodoru", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 139 [ISBN 978-83-60514-18-4]
58. R.Karcz, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Mechanism of Cyclooctane Oxidation with Dioxygen in the Presence of Cobalt Heteropolysalts", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 91 [ISBN 978-83-60514-18-4]
59. R.Karcz, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, D.Mucha, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Wpływ uwodnienia na skład fazowy soli kwasów $H_3PMO_{12}O_{40}$ i $H_3PW_{12}O_{40}$ z kationami dwuwartościowymi, na przykładzie jonu Co^{2+} ", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 172 [ISBN 978-83-60514-18-4]
60. K.Kilan, J.Piekoszewska, R.P.Socha, P.Warszyński, L.Szyk-Warszyńska "Calcium Binding Multilayer Films with Embedded Casein", Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013, p. 456
61. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Influence of Calcium Ions on the Buildup and Permeability of Multilayer Polymer Films", Book of Abstracts. Bioelectrochemistry 2013. 12th Topical Meeting of Int. Soc. of Electrochem. & 22th Int. Symp. on Bioenergetics of Bioelectrochem. Soc., Bochum 2013, p.249
62. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Wpływ jonów wapnia na powstawanie i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polimerowych zawierających alginian", Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, 6 (I) (2013) 78
63. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "How Calcium Ions Influence the Formation of poly-L-Arginine/Alginate Multilayers ?", Materials. COST Action CM1101 WG2, WG3 & WG4 Meeting 'Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites', Szeged 2013, p.48 [ISBN:978-963-306-220-3]

64. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Effect of Crosslinking by Calcium Ions on the Buildup and Permeability of Alginate Containing Multilayer Films", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.P20
65. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Fourier Transform Infrared Spectroscopy Analysis of Casein Embedded into Multilayer Films", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.P21
66. A.Klimek, J.Dziadkowiec, M.Rogowska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, A.Gawęł, E.M.Serwicka, K.Bahranowski "Delaminacja kationowych i anionowych form minerałów warstwowych", in: "Sorbenty Mineralne (Surowce, Energetyka, Ochrona Środowiska, Nowoczesne Technologie)" (T.Ratajczak, G.Rzepa, T.Bajda eds.), Wydawnictwa AGH, Kraków 2013, pp. 201-214 [ISBN 978-83-7464-629-1]
67. D.Knack, N.Zawada, M.Szaleniec "Development of an Overproducing System for Steroid C25 Dehydrogenase - A Novel Molybdoenzyme Catalyzing Regioselective Oxidation of Cholesterol Derivates", Conference Materials. 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013, p. 93
68. D.Kosior, A.Niecikowska, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of Cationic Surfactant on Kinetics of the Three Phase Contact Formation at Mica and Teflon Surfaces", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T1.P25
69. D.Kosior, A.Niecikowska, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of CTABr on Kinetics of the Bubble Attachment to Hydrophilic/Hydrophobic Surfaces", Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013, p. 330
70. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Bubble Bouncing and Kinetics of the Three-Phase Contact Formation at Hydrophobic Surface in n-Octanol Solution", Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013, p. 82
71. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Mechanism of Three Phase Contact Formation by a Bubble Colliding with Hydrophobic Surfaces of Different Roughness", Book of Abstracts. 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013, p. 40
72. D.Kosior, J.Zawała, K. Małyśa "Influence of n-Octanol on the Bubble Bouncing and Coalescence Time at Solution Surface", Program and Abstracts. Smart and Green Interfaces 2013 Workshop of COST MP1106, Prague 2013, p. 56
73. D.Kosior, J.Zawała, R.Todorov, D.Exerowa, K.Małyśa "Bubble Bouncing and Stability of Liquid Films Formed under Dynamic and Static Conditions From n-Octanol Solutions", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T1.O20
74. R.Kosydar, M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz "The Effect of Support Properties in the Distribution of Pd-Nanoparticles in Catalysts Synthesized by 'Water-in-Oil' Microemulsion Method", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, paper 2-T1-23

75. R.Kosydar, M.Góral-Kurbiel, T.Szumelda, E.Bielańska, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Preparation, Characterization and Reactivity of Noble Metals Supported Catalysts with Size-Controlled Nanoparticles", Mater. Konf. Groupement De Recherche International (GDRI CNRS-PAN), Wierzba 2013, p. 93-98
76. M.Kozieł, M.Gryl, K.Stadnicka, W.Łasocha "Porównanie metod wyznaczania struktury krystalicznej z danych dyfrakcyjnych różnego pochodzenia", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013, p. A65 [ISBN 978-83-906218-7-6]
77. P.Kozyra, M.Radoń, J. Datka, E.Broclawik "Spin-Resolved Analysis: NO on Cu(I) Site", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013, paper P42
78. P.Kozyra, M.Świątek, J.Datka, E.Broclawik "Mechanism of Hydrogen Adsorption and Activation by Cu(I) and Ag(I) Sites in Zeolites: Energetic and Differential Electron Density Contributions", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 53 [ISBN 978-83-60514-18-4]
79. T.Kruk, K.Szczepanowicz, K.Kilan, P.Warszyński "The Modification of Polyelectrolyte Coatings for Biomedical Applications", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T8.P46
80. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński, "Functional Multilayer Films Formed with Reduced Graphene Oxide", Book of Abstracts. Conf. ImagineNano2013, Bilbao 2013, p. 87
81. T.Kruk, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, D.Kręgiel, P.Warszyński "Wielowarstwowe filmy polimerowe jako funkcjonalne powłoki", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013, p. 287 [ISBN 97883-60988-15-2]
82. M.Krzak, K.Szczepanowicz, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński "Self-Healing Performance of the Water-Based Anticorrosive Epoxy Coatings Loaded with Inhibitor-Containing Polyelectrolyte Capsules", Book of Abstracts. European Corrosion Congr. EUROCORR2013, Estoril 2013, p. 599
83. M.Krzak, K.Szczepanowicz, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński, T.Hack "Polyelectrolyte Capsules Loaded with Corrosion Inhibitors for Self-Healing Performance of the Anticorrosive Water-Based Epoxy Coatings", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 203 [ISBN 978-83-60514-18-4]
84. M.Krzak, K.Szczepanowicz, Z.Tabor, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński "'Smart' Nanocontainers and Water Traps as a Novel Approach to Active Anticorrosion Protection by Polymer Coatings", Abstracts. 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013, p. 61
85. M.Krzak, Z.Tabor, P.Nowak, P.Warszyński "Water Diffusion Process in the Composite Polymer Coatings - Experimental Verification of the Mathematical Model", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013, p. 42

86. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "New Development in Technology of Stable and Biodegradable Foam Generation - For Industrial and Biomedical Applications", Book of Abstracts. 46th Biennial Meeting of the Colloid Society 'Morphological Transformations and Responses in Colloidal Systems', Paderborn 2013, p. 54
87. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Silver Nanoparticles Adsorption on Solid Surfaces for Various Ionic Strengths", Book of Abstracts. 15th JCF Fruhjahrssymposium, Berlin 2013, p. 90
88. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Silver Nanoparticle Monolayers on PAH Modified Surfaces - QCM and AFM Studies", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013, p. 40
89. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Silver Nanoparticles Nonolayers Produced under Diffusion-Controlled Transport", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 233
90. M.Kujda, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, O.Bocheńska, G.Bras, A.Kozik, E.Bielańska, J.Barbasz "Antibacterial Properties of Charged-Stabilized Silver Nanoparticles", Book of Abstracts. Federation of European Biochemical Societies Congr. 'Mechanisms in Biology' Sankt Petersburg 2013, p. 608-609
91. Ł.Kuterasiński, M.Derewiński "Natura kwasowych centrów protonowych w zeolitach MFI izomorficznie podstawionych borem", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 175 [ISBN 978-83-60514-18-4]
92. M.Leżańska, A.Olejniczak, A.Pacuła, J.Włoch, A.Kucińska, J.P.Łukaszewicz "Creaction of Microporosity in Highly Ordered Mesoporous N-Containing Carbons Obtained from Chitosan", Conference Proceedings. 5th Czech-Italian-Spanish Conf. on Molecular Sieves and Catalysis, Segovia 2013
93. K.Luberda-Durnaś, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały typu $ZnS_xSe_{1-x}(1,3-DAP)_{1/2}$ ", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 176 [ISBN 978-83-60514-18-4]
94. K.Luberda-Durnaś, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe będące prekursorami półprzewodników", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013, p. R16 [ISBN 978-83-906218-7-6]
95. W.Łasocha, W.Nitek, B.Gaweł "Badania Strukturalne nowych polimolibdenianow 1,8-diaminooktanu", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 177 [ISBN 978-83-60514-18-4]
96. W.Łasocha, A.Szymańska, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania strukturalne nowych oktamolibdenianów alkiloanilinowych", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013, p. B56 [ISBN 978-83-906218-7-6]
97. W.Łasocha, A.Szymańska, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Crystal Structure Studies of a few New Octamolybdates", Acta Cryst. A, 69 (2013) 512

98. S.Łukasiewicz K.Szczepanowicz, A.Stachowicz, M.Dziedzicka-Wasylewska "Polyelectrolyte Nanocapsules for the Selective Clozapine Delivery to D2-5HT1A Heteromers", Book of Abstracts. 19th Int. Symp. on Microencapsulation, Pamplona 2013, p.130
99. S.Łukasiewicz, E.Błasiak, K.Szczepanowicz, M.Dziedzicka-Wasylewska "D2-5-HT1A Receptor Heteromers as a New Target for Antipsychotic Drug Delivery", Conference Handbook. Conf. HTRF in Drug Discovery, Avignon 2013, p.53
100. K.Małysa, "Kinetics and Mechanism of the Liquid Films Rupture During the Bubble Collisions with Liquid/Gas and Liquid/Solid Interfaces", Mater. Seminar 'Layers at Interfaces' dedicated to 70th birthday of Professor Emil Chibowski, UMCS, Lublin 2013, pp. 19-20
101. L.Matachowski, E.Lalik, Ż.Kalemba-Jaje, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka, B.Gil "The Comparison of Catalytic Activity of Tungstophosphoric Acid as a Bulk and as an Epitaxial Monolayer", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 107 [ISBN 978-83-60514-18-4]
102. L.Matachowski, E.Lalik, Ż.Kalemba-Jaje, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka, B.Gil "The Comparison of Catalytic Activity of Tungstophosphoric Acid as a Bulk and as an Epitaxial Monolayer", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013, paper 1-T2-177
103. A.Michna, Z.Adamczyk "Characterization of PDADMAC Monolayers on Mica by Streaming Potential Measurements", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T6.C1
104. A.Michna, Z.Adamczyk "Bulk and Monolayer Properties of poly(Diallyldimethylammonium chloride) (PDADMAC) Determined by DLS, and Electrokinetic Measurements", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 686
105. A.Michna, M.Cieśla, J.Barbasz "Deposition of Bimodal Particles on Mica", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013
106. E.Młyńczak, J.Gurgul, N.Spiridis, J.Korecki "Chemical Structure of the Metal-Oxide Interfaces", Book of Abstracts. 6th Int. Workshop on Surface Physics 'Functional Materials', Niemcza 2013
107. Ł.Mokrzycki, T.Machej, E Bielańska, E.Serwicka-Bahranowska "Mixed Oxides CuO-CeO₂ Catalysts for Total Oxidation of Volatile Organic Compounds (VOC) Prepared by 'One-Step' Synthesis", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 111 [ISBN 978-83-60514-18-4]
108. G.Mordarski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, K.Samson, M.Mosiąlek, D.Rutkowska-Żbik "Katalityczne własności materiałów elektrodowych stosowanych w jednokomorowym wysokotemperaturowym ogniwie paliwowym ze stałym elektrolitem tlenkowym (SC SOFC)", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 179 [ISBN 978-83-60514-18-4]

109. M.Morga, Z.Adamczyk "Electrokinetic Studies of Cationic Polyelektrolyte Monolayers on Mica", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.P28
110. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Morga, K.Kubiak "The Kinetics of Deposition of Silver Nanoparticles at PDADMAC Monolayers", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 738
111. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Silver Particle Monolayers and Bilayers on Solid Surfaces", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków, 2013, p. 57 [ISBN 978-83-60514-18-4]
112. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Streaming Potential Studies of α -Fe₂O₃/Ag Bilayers on Mica", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.P27
113. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Silver Particle Monolayers on Solid Surfaces: Electrokinetic Studies", Book of Abstracts. 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013, p. 57
114. M.Mosiałek, M Dudek, P.Nowak, R.P.Socha, „Silver migration caused by polarization at the Ag|Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} interface”, Abstracts. 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013, p. 70.
115. M.Mosiałek, G.Mordarski, P.Nowak, M.Krzak "Conversion Coatings on Magnesium Alloys: EIS and SEM Studies", Book of Abstracts. European Corrosion Congr. EUROCORR2013, Estoril 2013, p. 575
116. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska, M.Cieśla "Fibrinogen Monolayers of Controlled Coverage and Conformations for Biosensing Applications", Book of Abstracts. 3rd Int. Conf. on Materials and Applications for Sensors and Transducers, Prague 2013, p. P2P37
117. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Polystyrene Latex Particles Revealed by Electrokinetic, AFM and SEM Measurements", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T8.P28
118. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Wasilewska "Mechanism of Fibrinogen Adsorption Determined by AFM, Streaming potential and Colloid Deposition", Materials. COST Action CM1101 WG2, WG3 & WG4 Meeting 'Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites', Szeged 2013, p. 52 [ISBN:978-963-306-220-3]
119. A.Niecikowska, M.Krasowska, J.Ralston, K.Małyś "The Wetting Film Drainage and Rupture at Titania Surfaces of Different Hydrophobicity", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T1.P1
120. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Wstępne obliczenia procesu aktywacji cząsteczki O₂ na modyfikowanych HPA", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 154 [ISBN 978-83-60514-18-4]

121. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko, J.Haber "Electronic Properties of Modified Tungsten Heteropolyacids: DFT Modeling", Book of Abstracts. 245th National Meeting of the American Chemical Society, New Orleans 2013
122. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Obliczenia struktury elektronowej heteropolikwasów molibdenowych", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 153 [ISBN 978-83-60514-18-4]
123. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Modified Heteropolyacids - DFT Cluster Calculations", Book of Abstracts. Current Trends in Theoretical Chemistry CTTC-VI (A.Eilmes, J.Korchowiec, eds.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2013, O13 [ISBN 978-83-937915-0-7]
124. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Cyclic Voltammetry as an Efficient Tool for Characterization of Nanoparticle Films", Book of Abstracts. 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013. p.87
125. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Application of Cyclic Voltammetry Technique for Characterization of Nano- and Microsphere Monolayers", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 401
126. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, G.Mordarski "Effect of Densely Packed Monolayer on the Limiting Diffusion Current - Experimental View", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
127. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, G.Mordarski "Voltammetric Method for Determining Coverage of Densely Packed Spherical Particle Monolayer - Experimental View", CD-ROM Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
128. M.Nosek, P.Weroński, P.Batys, E.Bielańska "Effect of Particle Polydispersity on Limiting Diffusion Current", CD-ROM Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
129. P.Nowak, G.Mordarski, W.Satora "Electrocrystallization of Rhenium and Its Alloys from Aqueous Solutions, Book of Abstracts. 3rd Int. Conf. on By-Product Metals in Non-Ferrous Metals Industry 'On the Way to Complete Raw Materials Utilization", Wrocław 2013, p. 21
130. P.Nowak, M.Przybyła, M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Zimowska, M.Dąbkowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk "LSM-Ag Composite Material for Solid Oxide Fuel Cells", Book of Abstracts. 13th E-MRS Conf. on Composites and Ceramic Materials - Technology, Application and Testing. Białowieża 2013, p. 30
131. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Kujda, K.Małek, D.Synowiec "The Influence of Organic and Inorganic Stabilizing Agents on Antibacterial Properties of Silver Nanoparticles and the Enhancement Effect in SERS Measurements", Book of Abstracts. 6. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO2013, Szczecin 2013, p. 63
132. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Controlled Release of Silver Nanoparticles from Monolayers Deposited on PAH-Covered Mica", Book of Abstracts. 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013, p. 9

133. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Self-Assembled Silver Nanoparticles Monolayers on PAH-Covered Mica - AFM, SEM and Electrokinetic Characteristics", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 722
134. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Kinetics of Silver Nanoparticle Release from Monolayers - Influence of Size, Ionic Strength, pH and Temperature", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.P25
135. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, E.Bielańska "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna stabilnych suspensji nanocząstek srebra do zastosowań katalitycznych", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków, 2013, p. 26 [ISBN 978-83-60514-18-4]
136. J.Olszówka, R.Dula, R.Karcz, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.Serwicka-Bahranowska "Utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu wodą utlenioną w obecności katalizatorów hydrotalkitowych zawierających Sn", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 116 [ISBN 978-83-60514-18-4]
137. K.Onik, J.Podobiński, E.Bielańska, M.Derewiński "Mesoporous Layer Materials Containing Highly Dispersed Protozeolitic Clusters - Effective Catalysts for Liquid Phase Conversion of Terpene Hydrocarbons", Proceedings. 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013, p.348 [ISBN 978-5-903391-97-4]
138. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Izomeryzacja α -pinenu wobec nowych materiałów warstwowych", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 184 [ISBN 978-83-60514-18-4]
139. Ł.Orzeł, G.Stochel, R.van Eldik, D.Rutkowska-Żbik, M.Świrski, M.Witko "Transmetalacja chlorofilu a - mechanizmy aktywacji", Materiały. 17. Mikrosymposium 'Kinetyczne metody badania mechanizmów reakcji w roztworach', Poznań 2013, p. K-10
140. M.Oszajca, W.Łasocha "Zastosowanie danych synchrotronowych w udokładnianiu struktur z użyciem funkcji PDF", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013, p. B68 [ISBN 978-83-906218-7-6]
141. A.Pacula, P.Nowak, R.P.Socha, M.Zimowska, D.Mucha "Electroreduction of Oxygen and Hydrogen Peroxide over the Composites Containing Cobalt Nanoparticles Embedded in N-Doped Carbon Nanotubes", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 117 [ISBN 978-83-60514-18-4]
142. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "Multilayer Films with Reduced Graphene Oxide as a Base for Sensor Layers", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 204 [ISBN 978-83-60514-18-4]
143. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński, "Multilayer Polyelectrolyte Films Formed with Prussian Blue Nanoparticles and Reduced Graphene Oxide as a Sensitive Tool for H₂O₂ Detection", Book of Abstracts. Conf. ImagineNano2013, Bilbao 2013, p. 172

144. K.Pamin, R.Karcz, J.Połtowicz, J.Kryściak, Ł.Kończ "Catalytic Activity of Metallophthalocyanines in Oxidation of Phenol in Glycerol", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne*, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 140 [ISBN 978-83-60514-18-4]
145. T.Pańczyk "A Magnetically Controlled Drug Delivery Vehicle. Mechanism of Action from Molecular Dynamics Simulations", *Book of Abstracts. 8th Int. Conf. on Fine Particle Magnetism*, Perpignan 2013, p. 38
146. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, W.Zieliński, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Effect of Ester Group as Spacer on Surface Properties of Chemodegradable Cationic Surfactants", *Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics*, Moscow 2013, p. 396
147. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, W.Zieliński, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Surface Properties of Esterquat Surfactants - Effect of Molecular Structure and Hydrolysis", *Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics*, Moscow 2013, p. 396
148. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, W.Zieliński, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński, "Surface Properties of Esterquat and Diesterquat Surfactants - Effect of Molecular Structure and Hydrolysis", *CD-ROM Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS*, Sofia 2013, C1.P35
149. M.Paszek, A.Micek-Ilnicka, B.Gil "Aktywność katalityczna zeolitów MWW: MCM-22, MCM-56 i MCM-49 w reakcji konwersji etanolu", *Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne*, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 186 [ISBN 978-83-60514-18-4]
150. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Nanocapsules for Neuroprotective Drugs: Synthesis and Evaluation of Chemical and Pharmacological Properties", *Book of Abstracts. 19th Int. Symp. on Microencapsulation*, Pamplona 2013, p.126
151. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-Core and Polyelectrolyte-Coated Nanocarriers for Neuroprotective Drugs", *Book of Abstracts. 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine*, Poznań 2013. p.90
152. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Leśkiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Kapsułki z powłokami polielektrolitowymi jako nano-systemy dostarczania leków neuroprotekcyjnych", *Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego*, 6 (I) (2013) 140
153. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates: QM/MD Study", *Book of Abstracts. 3rd Molecular Materials Meeting M3*, Singapore 2013
154. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates: Structural and Dynamic Aspects", *Book of Abstracts. 3rd Molecular Materials Meeting M3*, Singapore 2013
155. W.Płaziński, M.Drach "Carbohydrate Ring Puckering: Transition Path Sampling Study", *Book of Abstracts. 2nd Annual CCP-BioSim Conf. 'Frontiers of Biomolecular Simulation'*, Nottingham 2013

156. W. Płaziński, M. Drach "The Structure of Calcium Alginate: Insights from the Molecular Modeling Studies", Book of Abstracts. Int. Symp. on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials ISAM4, Tokyo 2013
157. W. Płaziński, M. Drach "Carbohydrate Ring Puckering: Transition Path Sampling Analysis", Book of Abstracts. Conf. on Advances in Theory and Simulation of Non-Equilibrium System, London 2013
158. K. Podgórna, A. Dudzik, K. Szczepanowicz, M. Szaleniec, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Preparation of Alginate Gel Beads for Immobilization of (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase (PEDH) and E. coli Cells", Book of Abstracts. 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
159. K. Podgórna, A. Dudzik, K. Szczepanowicz, W. Snoch, M. Szaleniec, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Entrapment of (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase (PEDH) and E. coli Cells in Alginate Gel", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, I KiFP PAN, Kraków 2013, p. 145 [ISBN 978-83-60514-18-4]
160. J. Połtowicz, R. Karcz, K. Pamin, E. M. Serwicka "Removal of Allochthonic Compounds in the Presence of Cationic and Anionic Metallocomplexes", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013
161. J. Radoń, F. Antretter, A. Sadłowska, M. Łukomski, L. Bratasz "Saveing Energy in National Museum in Krakow, Poland - A Case of Green Climate Management", Proceedings. 3rd European Workshop on Cultural Heritage Preservation EWCHP 2013 (A. Troi, E. Lucchi, eds.), Felix Verlag Editrice, Milano 2013
162. M. Radoń, J. Szklarzewicz, E. Brocławik "Iron Spin-State Energetics of Biologically Relevant Complexes from DFT and Couples Cluster Calculations", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013, paper P49
163. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak-Nowak, D. Sarkowicz, W. Łasocha "Badania pigmentów z obrazów Henryka Siemiradzkiego", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013, p. B57 [ISBN 978-83-906218-7-6]
164. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, M. Grzesiak-Nowak, A. Pawlak, E. Nosek "Application of Crystallographic Methods to the Study of Paintings and Archaeological Objects", Acta Cryst. A, 69 (2013) 245
165. J. Rakoczy, B. Sulikowski, K. Czajka "Interrelationships between Coke Deposits in Faujasite, Mordenite and ZSM-5 and Shape-Selectivity in Alkylation and Isomerization Reactions", Book of Abstracts. 5th Int. Symp. on Advanced Micro- and Mesoporous Materials (V. Valtchev, ed.), Sofia 2013, p. 90
166. B. M. Rocha Martins, D. Snihirova, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Smart Water Based Epoxy Coatings Containing Inhibitor Filled Nanocapsules for Corrosion Protection of AA2024", Book of Abstracts. European Corrosion Congr. EUROCORR2013, Estoril 2013, p. 596

167. A.Rugor, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Steroid C25 Dehydrogenase – Homology Modeling and Substrate Spectrum", Conference Materials. 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013, p. 82
168. A.Rugor, S.Mordalski, J.Staroń, M.Tataruch, A.Bojarski, M.Szaleniec "Pozyskiwanie bakteryjnego katalizatora dehydrogenazy C-25 steroidowej i synteza 25-hydroksysteroli", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013, p. 397 [ISBN 97883-60988-15-2]
169. A.Rugor, M.Szaleniec, A.Bojarski, M.Witko "Aerobic Purification of Oxygen Sensitive Steroid C-25 Dehydrogenase - First Step to Synthesis of Pharmaceuticals", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 146 [ISBN 978-83-60514-18-4]
170. A.Rugor, M.Szaleniec, A.Bojarski, M.Witko "Zastosowanie bakteryjnej dehydrogenazy C-25 steroidowej do syntezy 25-hydroksycholesterolu" Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, 6 (I) (2013) 150,
171. D.Rutkowska-Żbik, G.Mazur, A.Drzewiecka-Matuszek, K.Rzęsikowska, Ł.Orzeł, G.Stochel, M.Witko "Vitamin B12 as a Drug Carrier: DFT Studies", Program & Book of Abstracts. Modeling Interactions in Biomolecules VI, Marianske Lazne 2013,matfyzpress, Praha 2013, p. 66 [ISBN 978-80-7378-244-3]
172. D.Rutkowska-Żbik, G.Mazur, A.Drzewiecka-Matuszek, K.Rzęsikowska, Ł.Orzeł, G.Stochel, M.Witko "Vitamin B12 as a Drug Carrier: DFT Studies", Program & Book of Abstracts. Modeling Interactions in Biomolecules VI, Marianske Lazne 2013,matfyzpress, Praha 2013, p. 67 [ISBN 978-80-7378-244-3]
173. D.Rutkowska-Żbik, M.Oszajca, A.Drzewiecka-Matuszek, A.Franke, M.Brindell, G.Stochel, M.Witko, R.van Eldik "The Influence of N-Methylimidazole on the Reactivity of a Model Complex for Cpd II - A Combined Experimental and Theoretical Study", Proceedings. 16th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC-16, Sapporo 2013, p. 119
174. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Aromatyzacja metanu na MoO₃/ZSM-5: badania nad mechanizmem reakcji", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 156 [ISBN 978-83-60514-18-4]
175. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, Ł.Orzeł, M.Romanowska, G.Stochel "Mechanizm otrzymywania metaloporfiryn w reakcji transmetalacji", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 157 [ISBN 978-83-60514-18-4]
176. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Morga, M.Oćwieja, E.Bielańska "Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica: Characterization by Colloid Deposition", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków, 2013, p. 188 [ISBN 978-83-60514-18-4]

177. K.Samson, M.Śliwa, R.Grabowski, D.Mucha, J.Mizera, M.Ruggiero, D.Rutkowska-Żbik, W.Rojek, M.Lachowska "Synthesis and Physicochemical Characterizations of CuO/Chromites Based Catalysts in Selective Hydrogenolysis of Glycerol", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013, paper T6-190
178. K.Samson, M.Śliwa, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.Mizera, D.Mucha, A.Kornas, M.Madej-Lachowska "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna katalizatorów do reakcji hydrogenolizy glicerolu, zawierających aktywną fazę miedziową na nośnikach chromitowych", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 205 [ISBN 978-83-60514-18-4]
179. W.Simka, M.Mosiąlek, G.Nawrat, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, J.Żak, A.Maciej, J.Szade, A.Winiarski "Anodic Oxidation of Ti-13Nb-13Zr Alloy", Abstracts. 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013, p. 79
180. W.Simka, M.Sowa, R.P.Socha, J.Michalska, G.Dercz, A.Krzakała "Modification of Niobium Surface via Plasma Electrolytic Oxidation in Silicate Solutions", Abstracts. 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013, p. 77
181. W.Simka, M.Sowa, R.Socha, J.K.Michalska, A.Krzakała "Anodic Oxidation of Tantalum in Silicate Solutions", Program & Book of Abstracts. Bioelectrochemistry 2013. 12th Topical Meeting of Int. Soc. of Electrochem. & 22th Int. Symp. on Bioenergetics of Bioelectrochem. Soc., Bochum 2013, Int. Soc. of Electrochem., Lusanne 2013, p. 265
182. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "High-Cholesterol-Induced Modifications in Phospholipid Bilayers: a Simulation Study", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013, p. 54
183. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Molecular Dynamics Simulations of High-Cholesterol Containing Membrane Vesicles", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013, p. 62
184. M.Skoczek, M.Nosek, T.Piecha, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Rotating Disk Electrode Voltammetry Measurements of Prostate Self-Fusion: an Experimental View", Book of Abstracts. 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013. p.
185. M.Skoczek, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska, P.Batys "Struktura błony prostaty - symulacje komputerowe", Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, 6 (I) (2013) 157
186. R.P.Socha, M.Szczepanik-Ciba, B.Strzelczyk, N.Spiridis, J.Wojas, J.Korecki "Utlenianie CO na odwrotnym modelowym katalizatorze MnO/Pt(111)", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 28 [ISBN 978-83-60514-18-4]
187. K.Sofińska, Z.Adamczyk "Monowarstwy HSA na powierzchni lateksów polistyrenowych", Book of Abstracts. 3. Konf. Doktorantów Wydziału lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013, p. 161 [ISSN 2084-977X]

188. K.Sofińska, Z.Adameczyk, M.Nattich-Rak "Recombinant Human Serum Albumin (rHSA) Monolayers on Colloidal Carriers", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013, p. 63
189. K.Sofińska, M.Nattich-Rak, Z.Adameczyk "Recombinant Human Serum Albumin (rHSA) Monolayers on polyStyrene Latex Particles", Book of Abstracts. Int Soft Matter Conf., Rome 2013, p. 410
190. A.Stępniewski, M.Radoń, P.Kozyra, J.Datka, E.Broclawik "Aktywność centrów Cu(I) i Cu(II) w zeolitach wobec NO: kanały przeniesienia elektronów w rozdzielczości orbitalnej i spinowej", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 158 [ISBN 978-83-60514-18-4]
191. M.Strojecki, M.Łukomski, Ł.Bratasz "Acoustic Emission as a New Tool for the Assessment of Microclimate Instability Impact on Wooden Art Objects", Proceedings. Joint Interim Conf. 'ICOM-CC Heritage Wood: Research & Conservation in the 21st Century', Warszawa 2013
192. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Tataruch, A.Dudzik, D.Knack, M.Witko, J.Heider "Mechanizm i enancjoselektywność reakcji hydroksylacji węglowodorów przez dehydrogenazę etylobenzenową", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013, p. 578 [ISBN 97883-60988-15-2]
193. M.Szaleniec, A.Dudzik, T.Borowski, D.Knack, J.Heider, M.Witko "Mechanistic Basis for Anaerobic Enantioselective Hydroxylation and Oxidative Dehydrogenation by Ethylbenzene Dehydrogenase", Conference Materials. 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013, p. 87
194. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Tataruch, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "Alternatywne mechanizmy reakcji katalizowanych przez dehydrogenazę etylobenzenową - modelowanie DFT i badania chromatograficzne", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 22 [ISBN 978-83-60514-18-4]
195. M.Szaleniec, A.Dudzik, W.Snoch, M.Tataruch, D.Knack, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko "Modelowanie reaktywności enzymatycznej za pomocą sieci neuronowych", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013, p. 590 [ISBN 97883-60988-15-2]
196. M.Szaleniec, P.Dyshlovenko, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Can Protein Adsorption be Described in Terms of Electrostatic Interactions ?", Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013, p. 77-78
197. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Tataruch, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, J.Bryjak, M.Witko, J. Heider "Application of Immobilized Ethylbenzene Dehydrogenase and Whole-Cell Recombinant Phenylethanol Dehydrogenase System for Synthesis of Chiral Alcohols", Abstracts. 5th Central European Congr. of Life Science, EUROBIOTECH 2013, Kraków 2013, p. 44
198. M.Szczepanik-Ciba, R.P.Socha, B.Figarska, E.Madej, N.Spiridis, J.Korecki "Synteza, charakterystyka i właściwości katalityczne mieszanych tlenków manganu i żelaza na MgO(001)", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 126 [ISBN 978-83-60514-18-4]

199. M.Szczepanik-Ciba, R.Socha, N.Spiridis, B.Figarska, E.Madej, J. Korecki "Synthesis and Properties of Epitaxial Mixed Fe-Mn Oxides on MgO(100)", Abstract Book. Interdisciplinary Surface Science Conf. ISSC-19, Nottingham 2013, p. 57
200. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as a Anticancer Drug Carriers", Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013, p.298
201. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Shell Nanocapsules with Emulsion Core as Carrier of Anticancer Drugs", Book of Abstracts. 19th Int. Symp. on Microencapsulation, Pamplona 2013, p.75
202. K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, T.Kruk, K.Podgórna, P.Warszyński "Targeted Drug Delivery Systems Based on Polyelectrolyte Nanocapsules", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.017
203. A.Szymańska, M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha "Badania strukturalne związków kadmu z symetrycznymi aminami", Materiały. 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013, p. A56 [ISBN 978-83-906218-7-6]
204. A.Szymańska, W.Nitek, W.Łasocha "Badania strukturalne nowych polimolibdenianów 4-etyloaniliny", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 193 [ISBN 978-83-60514-18-4]
205. A.Szymańska, K.Pamin, R.Karcz, J.Połtowicz, W.Łasocha "Molybdenum Oxo-Diperoxo and Oxo Complexes as Catalysts for the Oxidation of Cyclooctane with Molecular Oxygen", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013
206. A.Szymańska, K.Pamin, J.Połtowicz, R.Karcz, W.Łasocha "Oxo-Molybdate Complexes as Catalysts for the Oxidation of Cyclooctane with Molecular Oxygen", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2013, p. 127 [ISBN 978-83-60514-18-4]
207. M.Tataruch, M.Szaleniec, J.Bryjak, J.Opalinska-Piskorz, E.Luchter-Wasylewska, M.Witko, J.Heider "Immobilizowane dehydrogenazy jako narzędzia do biosyntezy chiralnych syntonów leków", Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, 6 (I) (2013) 179-180
208. M.Tataruch, M.Szaleniec, A.Dudzik, J.Bryjak, P.Nowak, W.Snoch, E.Luchter-Wasylewska, M.Witko "Chiralna synteza syntonów leków z wykorzystaniem dehydrogenazy etylobenzenowej i fenyloetanolowej", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013 [ISBN 97883-60988-15-2]
209. M.Tataruch, M.Szaleniec, A.Dudzik, J.Bryjak, P.Nowak, E.Luchter-Wasylewska, M.Witko, J.Heider "Biokatalityczna synteza chiralnych syntonów leków z wykorzystaniem immobilizowanych dehydrogenaz etylobenzenowej i fenyloetanolowej", Książka Abstraktów. Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013, p. 73-74 [ISBN 978-83-63503-12-3]

210. M.Tataruch, M.Szaleniec, J.Opalińska-Piskorz, P.Nowak, J.Bryjak, M.Witko, E.Luchter-Wasylewska "Wpływ immobilizacji na poprawę stabilności operacyjnej dehydrogenazy etylobenzenowej", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 148 [ISBN 978-83-60514-18-4]
211. M.Tatko, M.Mosiąlek, E.Bieleńska, D.Mucha "Catalytic Reduction of Oxygen on Composite Material $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3\text{-Ag}$ ", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 130 [ISBN 978-83-60514-18-4]
212. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, A.Kwapisz, M.Boruta, E.Bieleńska, G.Mordarski "Kompozytowy materiał katodowy $\text{Ag-La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3$ do zastosowania w stałotlenkowych ogniwach paliwowych", Book of Abstracts. 13th E-MRS Conf. on Composites and Ceramic Materials - Technology, Application and Testing. Białowieża 2013, p. 31
213. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, G.Mordarski, E.Bieleńska, J.Wojewoda-Budka, A.Michna "Composite Cathode Material $\text{Ag-Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3$ for Solid Oxide Fuel Cells", Abstracts. 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013, p. 86
214. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Wpływ położenia jonu Cu, w anionie Keggina, na obraz struktury elektronowej heteropolikwasów wolframowych. Obliczenia klasterowe DFT", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 159 [ISBN 978-83-60514-18-4]
215. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu Ion as an Additional Element in Keggin Anion. DFT Cluster Calculations of Modified Cu-HPA", Book of Abstracts. Current Trends in Theoretical Chemistry CTTC-VI (A.Eilmes, J.Korchowiec, eds.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2013, P41 [ISBN 978-83-937915-0-7]
216. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu jako dodatkowy element w strukturze heteropolikwasów o geometrii Keggina", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013 p, 585 [ISBN 97883-60988-15-2]
217. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu Ion as an Additional Element in Keggin Anion. DFT Cluster Calculations of Modified Cu-HPA", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013 p, 588 [ISBN 97883-60988-15-2]
218. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oddziaływanie HPW modyfikowanych Co z ugrupowaniami tlenowymi reaktywnymi w procesach utleniania", Materiały Zjazdowe, 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013 p, 588 [ISBN 97883-60988-15-2]
219. V.Ulaganathan, M.Krzan, M.Lotfi, S.S.Dukhin, K.Małysa, R.Miller "Influence of β -Lactoglobulin and Its Surfactant Mixtures", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
220. J.Vit, R.Dula, A.Michalik-Zym, D.Mucha, R.P.Socha, M.Śliwa, R.Grabowski, E.M.Serwicka "Zirconium and Gallium as Promoters of Hydrotalcite Derived $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ Catalyst for the Conversion of CO_2 to Methanol", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013, paper 3-T9-354

221. P.Weroński, P.Batys, M.Nosek "Voltammetric Method for Determining of Densely Packed Spherical Particle Monolayer - Theoretical Study", CD-ROM Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
222. P. Weroński, M. Nosek, P. Batys "Effect of Densely Packed Monolayer on the Limiting Diffusion Current - Theoretical Modeling", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sandomie 2013, p. 66
223. T.Wilkosz, E.Bielańska, J.Camra, I.Dukla, J.Dutkiewicz, P.Kornelak, M.Kozicki, M.Najbar, A.Wesółucha-Birczyńska "Wpływ powinowactw do tlenu i temperatur parowania metali wchodzących w skład folii ze stali kwasoodpornej na fizykochemiczne własności tworzących się na niej warstw tlenkowych", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 131 [ISBN 978-83-60514-18-4]
224. M.Witko, P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś "Heteropolycompounds - What Can We Learn from DFT Studies", Book of Abstracts. Symp.on Nanostructured Materials, Rzeszow 2013
225. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, R.Gryboś "Electronic Properties of Selected Heteropolyacids. DFT Modeling", Book of Abstracts. 6th IDECAT/ERIC Conf. on Catalysis 'Design Advanced Multifunctional Catalysts for Sustainable Processes', Bressanone 2013
226. W.Włodarczyk, A.Michalik-Zym, E.Wisła-Walsh, A.Klimek, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Dializa jako metoda zwiększania powierzchni właściwej sodowej formy montmorillonitu i pochodnych nanostruktur", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 197 [ISBN 978-83-60514-18-4]
227. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of Cushion Material and Preparation Conditions on the Formation of Supported Lipid Bilayers", Book of Abstracts. 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013, p. PC.10
228. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of Solid Surface Modification on the Formation of Supported Lipid Bilayers", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T1.P29
229. P.Wolski, A.Brzyska, K.Woliński "Podwójna baza funkcyjna w obliczeniach elektrycznych i magnetycznych właściwości molekularnych", Książka Abstraktów. 30. Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej SPTChem, Przewież 2013, p. P76
230. N.Zawada, A.Rugor., M.Tataruch, D.Knack, M.Szaleniec "Bacterial Steroid C-25 Dehydrogenase - A Novel Biocatalyst for Regioselective Hydroxylation of Steroid Compounds", Abstracts. 5th Central European Congr. of Life Science, EUROBIOTECH 2013, Kraków 2013, p. 50
231. J.Zawała, S.Dorbolo, N.Vandewalle, K.Małyś "Immortal Mubbles - Effect of Interface Vibrations on Bubble Coalescence Time at Pure Water Surface", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C3.O3

232. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Kinetics of the Bubble Collisions at Hydrophilic Fritted Glass with Controlled Air Presence - Experiments and Numerical Simulations", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T1.P24
233. J.Zawała, K.Podgórna, K.Szczepanowicz, A.Kupiec, Sz.Wojtyła, P.Warszyński "The Drop Size in Membrane Emulsification: Theoretical and Experimental Studies", Book of Abstracts. 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013, p. 39
234. W.Ziemińska, A.Brzyńska, K.Woliński "Modelowanie wpływu efektów rozpuszczalnikowych na magnetyczne stałe ekranowania jąder azotu w cząsteczkach azoli", Książka Abstraktów. 30. Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej SPTChem, Przewięż 2013, p. P71
235. W.Ziemińska, P.Wolski, A.Brzyńska, K.Woliński "Deformacje nanorurek węglowych w obecności sił zewnętrznych - symulacje kwantowo-chemiczne", Książka Abstraktów. Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013, p. 191 [ISBN 978-83-63503-12-3]
236. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "FTIR and MAS NMR (²⁷Al, ²⁹Si) as Complementary Methods in the study of Aluminated Porous Heterostructures (PCH) Derived from Laponite", Book of Abstracts. 15th Int. Clay Conf., Rio de Janeiro 2013, p. 667
237. M. Zimowska, H. Pálková, J. Madejová, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka, „Komplementarność metod FTIR i MAS NMR (²⁷Al, ²⁹Si) w zastosowaniu do badania aluminiacji porowatych heterostruktur typu PCH na osnowie Laponitu”, Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 199 [ISBN 978-83-60514-18-4]
238. A.Żelazny, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów Ag-Cu/Al₂O₃ do hydrogenolizy glicerolu", Materiały. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2013, p. 200 [ISBN 978-83-60514-18-4]
239. A.Żelazny, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Synthesis and Physico-chemical Characterization of Ag-Cu/Al₂O₃ and Ag-Cu/TiO₂ Catalysts for Glycerol Hydrogenolysis", Proceedings. 16th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC-16, Sapporo 2013, p.184
240. A.Żelazny, M.Śliwa, R.Grabowski, M.Ruggiero, K.Samson, D.Rutkowska-Żbik, Ł.Mokrzycki, T.Machej "Role of the Modification of the Metallic and Acidic Components in the Catalysts for One Stage DME Synthesis from Syngas", Book of Abstracts. 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013, Lyon, 2013, paper T5-212
241. P.Żeliszewska, A.Bratek-Skicki, Z.Adamczyk "Mechanism of Human Fibrinogen Adsorption on Latex Particles", Book of Abstracts., 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013, p. 67
242. P.Żeliszewska, A.Bratek-Skicki, Z.Adamczyk "Electrokinetic and AFM Studies of Fibrinogen Adsorption on Colloid Particles", Book of Abstracts. Federation of European Biochemical Societies Congr. 'Mechanisms in Biology' Sankt Petersburg 2013, p. 159

243. P.Żeliszewska, A.Brateg-Skicki, Z.Adamczyk "Tuning Conformations and Stability of Fibrinogen Monolayers on Latex Particles", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. T7.P31
244. P.Żeliszewska, A.Brateg-Skicki, Z.Adamczyk "Electrokinetic and AFM Studies of Fibrinogen Adsorption on Colloid Particles", Book of Abstracts. 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013, p. C1.O3

ARTYKUŁY W DRUKU

1. Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki, P.Żeliszewska, M.Wasilewska "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption at Solid Substrates", Current Topics in Medicinal Chemistry", Current Topics in Medicinal Chemistry, 2013
2. A.Brateg-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Human Fibrinogen Adsorption on Latex Particles at pH 7.4 Studied by Electrophoretic Mobility and AFM Measurements", Current Topics in Medicinal Chemistry, 2013
3. W.Barzyk, K.Lunkenheimer, P.Warszyński, B.Jachimska, A.Pomianowski "Effect of Molecular Structure of Amphiphiles on the Surface Pressure and Electric Surface Potential Isotherms at the Air/Solution Interface", Colloids Surf. A
4. J.Cybulska, A.Brzyska, A.Zdunek, K.Wolinski "Simulation of Force Microscopy Experiments on Galacturonic Acid Oligomers", Biomacromolecules (submitted)

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. "XLV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, XVI Polish Annual Conference on Catalysis, 13-15.03.2013, Kraków" (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków, 2013, pp. 225 [ISBN 978-83-60514-18-4]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY OTRZYMANE

1. T.Machej, G.Wielgosiński, A.Grochowalski, T.Pajak, W.Ćwiąkalski, R.W.Łoziński, E.Serwiska-Bahranowska "Sposób wytwarzania katalizatora wanadowo-wolframowego do destrukcji związków organicznych zawierających chlor, a zwłaszcza dioksyn i furanów". Patent RP, wg zgłoszenia P.392503 (19.12.2013)
2. J.Połtowicz, K.Pamin, E.Serwicka-Bahranowska "Sposób epoksydacji propylenu" Patent RP, PL214373 (29.07.2013)
3. M.Lipiński, J.Cichoszewski, R.P.Socha "Sposób teksturowania powierzchni krzemu krystalicznego", Patent RP, PL213197 (31.01.2013)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

1. Ł.Mokrzycki, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Zimowska, T.Machej, E.M.Serwicka "Sposób wytwarzania monolitycznego tlenkowego katalizatora manganowo-miedziowego domieszkowanego cyrkonem i cerem do utleniania zanieczyszczeń, zwłaszcza organicznych, w procesach oczyszczania gazów", zgłoszenie patentowe RP, P.406542 (16.12.2013)
2. Ł.Mokrzycki, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Zimowska, T.Machej, E.M.Serwicka "Sposób wytwarzania tlenkowego katalizatora miedziowo-manganowego na nośniku monolitycznym do utleniania zanieczyszczeń, zwłaszcza organicznych, w procesach oczyszczania gazów", zgłoszenie patentowe RP, P.406545 (16.12.2013)
3. M.Szaleniec, M.Tataruch, J.Bryjak, P.Nowak "Sposób otrzymywania chiralnie czystych alkoholi alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych oraz układ reaktorowy do realizacji tego sposobu", zgłoszenie patentowe RP, P.406286 (27.11.2013)

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH 2013

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Ł.Bratasz "Reviewing the Guidelines: Allowable Microclimatic Variations in Museums and Historic Buildings", Int. Scientific Workshop 'Heritage Science and Sustainable Development for the Preservation of Art and Cultural Assets - On the Way to the Green Museum', Berlin 2013
2. E.Broclawik, M.Radoń, A.Stępniewski "Nitric Oxide as a non-Innocent, Redox-Active Ligand in Catalytic and Biomimetic Systems: Resolution of Electron Transfer Processes", 6th Int. Annual Meeting 'Catalysis for Polluting Emissions Aftertreatment and Production of Renewable Energies', Groupement de Recherche International (GDRI CNRS-PAN), Wierzba 2013
3. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Nitric Oxide as a non-Innocent Ligand in (Bio-)Inorganic Complexes: Charge Transfer Resolution", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry CTTC-VI, Kraków 2013
4. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Nitric Oxide as a non-Innocent Ligand in (Bio-)Inorganic Complexes: Charge and Spin Transfer", 4th Georgian Bay Int. Conf. on Bioinorganic Chemistry, Parry Sound 2013
5. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Tlenek azotu(II) jako „non-innocent” ligand w kompleksach (bio-)nieorganicznych: analiza kanałów przepływu ładunku", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
6. M. Derewiński "Kraking Katalityczny", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
7. J.Heider, M.Szaleniec, D.Knack, K.Sünwoldt "Ethylbenzene Dehydrogenase and Related Enzymes: Mechanism and Functions", 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013
8. W.Łasocha "New Porous Materials and Catalysts - Scientific Results", Science Link Meeting 'Enhancement of Cross-border Cooperation between Research Infrastructures', Sankt Petersburg 2013
9. W.Łasocha "Metody krystalografii w sztuce". 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
10. M.Łukomski "Speckle Interferometry in the Characterisation of Surface Damage in Art Objects", Int. Symp. 'Fundamentals of Laser Assisted Micro- and Nanotechnologies FLAMN-13', Sankt Petersburg 2013
11. M.Łukomski "Zarządzanie dziedzictwem kultury - wyzwanie dla nauk ścisłych", 2. Naukowe Warsztaty Wyjazdowe 'Medycyna regeneracyjna' ISD MOLMED, Zakopane 2013
12. K.Małyśa, "Kinetics and Mechanism of the Liquid Films Rupture During the Bubble Collisions with Liquid/Gas and Liquid/Solid Interfaces", Seminar 'Layers at Interfaces' dedicated to 70th birthday of Professor Emil Chibowski, UMCS, Lublin 2013

13. B.Sulikowski "Five-Fold Symmetry in Science and Art", 16th National Conf. on Superconductivity and Strongly Correlated Systems, Zakopane 2013
14. B.Sulikowski "Symetria pięciokrotna w chemii i kulturze", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
15. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Tataruch, A.Dudzik, D.Knack, M.Witko, J.Heider "Mechanizm i enancjoselektywność reakcji hydroksylacji węglowodorów przez dehydrogenazę etylobenzenową", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
16. M.Szaleniec, P.Dyshlovenko, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Can Protein Adsorption be Described in Terms of Electrostatic Interactions ?", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013
17. P.Warszyński "Multilayer Functional Coatings:Thin Films and Nanocapsules", Workshop 'Polymeric Nanostructurals Systems', Krakow 2013
18. P.Weroński "From Randomness to order: Modeling of Deposition of Colloidal Particles", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
19. M.Witko, P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.GryboS "Heteropolycompounds - What Can We Learn from DFT Studies", Symp.on Nanostructured Materials, Rzeszów 2013
20. M.Witko, P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, J.Haber "Electronic Properties of Modified Tungsten Heteropolyacids: DFT Modeling", 245th National Meeting of the American Chemical Society, New Orleans 2013
21. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, R.Gryboś "Electronic Properties of Selected Heteropolyacids. DFT Modeling", 6th IDECAT/ERIC Conf. on Catalysis 'Design Advanced Multifunctional Catalysts for Sustainable Processes', Bressanone 2013

REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z.Adamczyk "Mechanism and Kinetics of Nanoparticle and Protein Adsorption", COST Action CM1101 WG2, WG3 & WG4 Meeting 'Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites', Szeged 2013
2. Z.Adamczyk "Nanoparticles and Proteins at Surfaces: Revealing Universal Adsorption Mechanisms", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
3. P.Batys "Structure and Transport Properties of Colloidal Multilayers", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
4. P.Batys, P.Weroński "Controlling Structure and Surface Properties of LbL Multilayers", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
5. P.Batys, P.Weroński "Surface Properties of Particle Multilayers - Numerical Studies", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013

6. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido, J.-M.Krafft, S.Dźwigaj "SCR of NO with Ammonia on Fe-Containing Zeolite Catalysts", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
7. T.Borowski, A.Miłaczewska, A.Wójcik "Insights into Reaction Mechanisms of Representative Mononuclear non-Heme Iron Enzymes. DFT Studies", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013
8. M.Cieśla, M.Wierzchoń, G.Mazgaj, J.Barbasz "Implicit Learning Study Using Social Network", 1st Int. Avant-Conf. 'Trends in Interdisciplinary Studies', Toruń 2013
9. M.Cieśla, M.Wierzchoń, G.Mazgaj, J.Barbasz, I.Cieśla "Click The Bomb! The Implicit Learning Study Using Social Network", 26th M.Smoluchowski Symp. on Statistical Physics, Kraków 2013
10. J.Dziedzic "Studies on the Photocatalytic Degradation of the Humic Substances Supported by Chemical Oxidation", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
11. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Degradation of Industrial Dyes in Photocatalytic Process", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sandomie 2013
12. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Modified, Natural Clinoptilolites from Slovakia and Mexico as Catalysts for Liquid-Phase Isomerization of α -Pinene", 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013
13. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne modyfikowanego klinoptylolitu ze Słowacji", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
14. M.Elzbieciak-Wodka, K.Kilan, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of Electrostatics and Hydration on Formation and Permeability of Polyelectrolyte Multilayers", COST CM1101 WG2 & WG5 Meeting 'Balance of Interactions in Soft Matter Systems: Thermodynamics, Structure and Kinetics', Nicosia 2013
15. U.Filek, B.Sulikowski "Polyoxometalate in Catalysis", Joint Working Group Meeting COST Action 1203 - Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience, Aveiro 2013
16. M.Gackowski "Deposition of Zeolite Nanoparticles onto Silica Monolith", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
17. J.Gao, J.Handzlik, R.Gryboš, J.-M.Jehng, I.E.Wachs, S.Podkolzin "Spectroscopic and Computational Study of Cr and Mo Oxide Nanostructures in ZSM-5 for Methane Dehydroaromatization", 23rd North American Catalysis Society Meeting, Louisville 2013
18. T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, N.Spiridis, J.Korecki "The Investigation of High Temperature Tungsten Oxide Phases and Their Transitions with LEEM Microscopy", 8th Int. Conf. Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice 2013
19. M.Góra, B.Kozik, M.Nattich-Rak, K.Jamroży, M.Łuczyński "Application of Aqueous Solutions of Phosphates and Surfactants for Hydrothermal Biomass Pretreatment", 4th Int. Environmental Best Practices Conf., Olsztyn 2013

20. M.Grzesiak-Nowak "Metal-Organic Frameworks of Metals from s-block - New Barium and Strontium Dicarboxylates", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
21. M.Grzesiak-Nowak, A.Szymańska, G.Appleby, W.Łasocha "XRPD Structural Studies of New Group of Coordination Polymers10. Krajowe Symp. Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego, Stalowa Wola 2013
22. B.Jachimska "Bovine Serum Albumin (BSA) Conformation Investigated by Quartz Crystal Microbalance (QCM-D) Measurements, Surface Plasmon Resonance (MP-SPR) and Atomic Force Microscopy (AFM) Measurements on a Silica Surface", 6th Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS'2013, Łochów 2013
23. B.Jachimska "Structure of Adsorbed Dendrimer Monolayers Investigated by Combining QCM-D and MP-SPR Techniques", Int. SPR Workshop 'New Dimensions in Life Sciences', Kraków 2013
24. A.Jagusiak, B.Piekarska, T.Pańczyk, P.Laidler "Badanie właściwości kompleksów nanorurek węglowych i związków typu czerwieni kongo jako potencjalnych układów celowanego dostarczania leków", 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013
25. M.Jaworska, E.Sikora, K.Szczepanowicz, J.Ogonowski "Wpływ rodzaju surfaktanta na fizykochemiczne właściwości nanoemulsji na bazie kwasu oleinowego", Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013
26. M.Jaworska, E.Sikora, K.Szczepanowicz, J.Ogonowski "Wpływ charakteru bazy emulsyjnej zawierającej kwas oleinowy na uwalnianie mentolu", Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013
27. M.Kolasińska-Sojka, A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Electroactive Properties of the Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", 14th Int. Conf. on Organized Molecular Films (LB 14) ICOMF14, Paris 2013
28. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Bubble Bouncing and Kinetics of the Three-Phase Contact Formation at Hydrophobic Surface in n-Octanol Solution", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013
29. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Mechanism of Three Phase Contact Formation by a Bubble Colliding with Hydrophobic Surfaces of Different Roughness", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
30. D.Kosior, J.Zawała, K. Małyśa "Influence of n-Octanol on the Bubble Bouncing and Coalescence Time at Solution Surface", COST MP1106 Workshop 'Smart and Green Interfaces', Prague2013
31. D.Kosior, J.Zawała, R.Todorov, D.Exerowa, K.Małyśa "Bubble Bouncing and Stability of Liquid Films Formed under Dynamic and Static Conditions From n-Octanol Solutions", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013

32. R.Kosydar, M.Góral-Kurbiel, T.Szumęła, E.Bielańska, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Preparation, Characterization and Reactivity of Noble Metals Supported Catalysts with Size-Controlled Nanoparticles", 6th Int. Annual Meeting 'Catalysis for Polluting Emissions Aftertreatment and Production of Renewable Energies', Groupement de Recherche International (GDRI CNRS-PAN), Wierzba 2013
33. T.Kruk, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, D.Kręgiel, P.Warszyński "Wielowarstwowe filmy polimerowe jako funkcjonalne powłoki", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
34. M.Krzak "Anticorrosive Polymer Coatings with Water Barrier Properties Improved by Water Traps Addition", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
35. M.Krzak, K.Szczepanowicz, Z.Tabor, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński "'Smart' Nanocontainers and Water Traps as a Novel Approach to Active Anticorrosion Protection by Polymer Coatings", 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013
36. M.Krzak, Z.Tabor, P.Nowak, P.Warszyński "Water Diffusion Process in the Composite Polymer Coatings - Experimental Verification of the Mathematical Model", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
37. M.Krzak, K.Małyś "Influence of Electrolyte on Bubble Motion in Solutions of Ionic and Non-Ionic Surface Active Substances", COST CM1101 Workshop 'Dynamic and Liquid Interfaces', Potsdam-Golm 2013
38. L.Krzemiń, M.Łukomski, M.Strojecki, Ł.Bratasz "The Effect of Growth Rings Structure on the Response of Wood Subjected to Changing Climate Conditions", Conf. 'Computational Plasticity XII - Fundamentals and Applications', na 2013
39. L.Krzemiń, M.Łukomski "Time-Averaged Digital Speckle Pattern Interferometry for Investigation of Art Objects Surfaces", Conf. on New techniques for the Non-Invasive Investigation of the Surface and Subsurface Structure of Heritage Objects", Toruń 2013
40. K.Kubiak, Z.Adameczyk "Silver Nanoparticle Monolayers on PAH Modified Surfaces - QCM and AFM Studies", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
41. Ł.Kuterasiński "On the Nature of Brønsted Acid Sites Generated in MFI Type of Zeolite Isomorphously Substituted with Boron", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
42. K.Luberda-Durnaś "Hybrid Organic-Inorganic Layered Materials, Precursors of Semiconducting Nanostructures", Conf. Transdisciplinary Cooperation and Applications of Nanoscience, Kraków 2013
43. K.Luberda-Durnaś, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe będące prekursorami półprzewodników", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013

44. M.Łukomski, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Saveing Energy in National Museum in Krakow, Poland - A Case of Green Climate Management", Int. Scientific Workshop 'Heritage Science and Sustainable Development for the Preservation of Art and Cultural Assets - On the Way to the Green Museum', Berlin 2013
45. M.Łukomski, L.Krzemień "Automated Analysis of Art Object Surfaces Using Time-Averaged Digital Speckle Pattern Interferometry", 4th Conf. on Optics for Arts, Architecture, and Archaeology, SPIE Optical Metrology, Munich 2013
46. E.Małyśa, J.Zawała, K.Małyśa "A Sensitive and Simple Method for Controlling Concentration of Flotation Reagents in Waters of the Coal Processing Plants", 17th Int. Coal Preparation Congr. Istanbul 2013
47. K.Małyśa, J.Zawała, M.Krzan, E.Małyśa "Rising Bubble Velocity in Monitoring Contaminations of Environmental and Industrial Waters", COST CM1101 Workshop 'Dynamic and Liquid Interfaces', Potsdam-Golm 2013
48. E.Młyńczak, J.Gurgul, N.Spiridis, J.Korecki "Chemical Structure of the Metal-Oxide Interfaces", 6th Int. Workshop on Surface Physics 'Functional Materials', Niemcza 2013
49. G.Mordarski "Węglowe ogniwa paliwowe z elektrolitem węglanowym". Konf. Węglowe Ogniwa Paliwowe, Bełchatów 2013
50. M.Mosiąłek, M.Dudek, P.Nowak, R.P.Socha "Silver Migration Caused by Polarization at the Ag|Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.90}O_{0.95} Interface", 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013
51. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Physicochemical Properties of Modified Cu-HPA: Influence of Cu Position in Keggin Anion", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
52. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Modified Heteropolyacids - DFT Cluster Calculations", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry CTTC-VI, Kraków 2013
53. M.Nosek "Cyclic Voltammetry Method for Examining Ion Transport Through Porous Layer", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
54. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, G.Mordarski "Effect of Densely Packed Monolayer on the Limiting Diffusion Current - Experimental View", Book of Abstracts. 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013, p. 50
55. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, G.Mordarski "Effect of a Densely Packed Monolayer on the Limiting Diffusion Current - Experimental View", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
56. P.Nowak, G.Mordarski, W.Satora "Electrocrystallization of Rhenium and Its Alloys from Aqueous Solutions, 3rd Int. Conf. on By-Product Metals in Non-Ferrous Metals Industry 'On the Way to Complete Raw Materials Utilization", Wrocław 2013

57. P.Nowak, M.Przybyła, M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Zimowska, M.Dąbkowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk "LSM-Ag Composite Material for Solid Oxide Fuel Cells", 13th E-MRS Conf. on Composites and Ceramic Materials - Technology, Application and Testing. Białowieża 2013
58. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Kujda, K.Małek, D.Synowiec "The Influence of Organic and Inorganic Stabilizing Agents on Antibacterial Properties of Silver Nanoparticles and the Enhancement Effect in SERS Measurements", 6. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO2013, Szczecin 2013
59. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Controlled Release of Silver Nanoparticles from Monolayers Deposited on PAH-Covered Mica", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
60. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, E.Bielańska "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna stabilnych suspensji nanocząstek srebra do zastosowań katalitycznych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
61. K.Onik "Zeolite Seeds Precursors Incorporated in the Mesoporous Framework: Physicochemical and Catalytic Properties", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
62. Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Żbik, R.van Eldik, L.Fiedor, M.Witko, G.Stochel "Transmetalation of Chlorophylls: Distort to Activate", 2nd EuCheMS Inorganic Chemistry Conf., Jerosolima 2013
63. Ł.Orzeł, G.Stochel, R.van Eldik, D.Rutkowska-Żbik, M.Świrski, M.Witko "Transmetalacja chlorofilu a - mechanizmy aktywacji", 17. Mikrosymposium 'Kinetyczne metody badania mechanizmów reakcji w roztworach', Poznań 2013
64. M.Oszajca, W.Łasocha, "Udokładnianie struktur z uzyciem funkcji PDF", 10. Krajowe Symp. Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego, Stalowa Wola 2013
65. A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Electroactive Multilayer Films of Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles as a Sensitive Tool for H₂O₂ Detection", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
66. T.Pańczyk "A Magnetically Controlled Drug Delivery Vehicle. Mechanism of Action from Molecular Dynamics Simulations", 8th Int. Conf. on Fine Particle Magnetism, Perpignan 2013
67. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Nanocapsules for Neuroprotective Drugs: Synthesis and Evaluation of Chemical and Pharmacological Properties", 19th Int. Symp. on Microencapsulation, Pamplona 2013
68. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates: Structural and Dynamic Aspects", Book of Abstracts. 3rd Molecular Materials Meeting M3, Singapore 2013
69. W.Płaziński, M.Drach "The Structure of Calcium Alginate: Insights from the Molecular Modeling Studies", Int. Symp. on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials ISAM4, Tokyo 2013

70. W. Płaziński, M. Drach "Carbohydrate Ring Puckering: Transition Path Sampling Analysis", Conf. on Advances in Theory and Simulation of Non-Equilibrium System, London 2013
71. J. Radoń, F. Antretter, A. Sadłowska, M. Łukomski, Ł. Bratasz "Simulation of Energy Consumption for Dehumidification with Cooling in National Museum in Krakow", 3rd European Workshop on Cultural Heritage Preservation EWCHP 2013, Bolzano 2013
72. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, M. Grzesiak-Nowak, A. Pawlak, E. Nosek "Application of Crystallographic Methods to the Study of Paintings and Archaeological Objects", 28th European Crystallography Meeting, Coventry 2013
73. D. Rutkowska-Żbik, G. Mazur, A. Drzewiecka-Matuszek, K. Rzęsikowska, Ł. Orzeł, G. Stochel, M. Witko "Vitamin B12 as a Drug Carrier: DFT Studies", Conf. Modeling Interactions in Biomolecules VI, Marianske Lazne 2013
74. D. Rutkowska-Żbik, M. Oszejca, A. Drzewiecka-Matuszek, A. Franke, M. Brindell, G. Stochel, M. Witko, R. van Eldik "The Influence of N-Methylimidazole on the Reactivity of a Model Complex for Cpd II - A Combined Experimental and Theoretical Study", 16th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC-16, Sapporo 2013
75. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, J. Korecki "Nauczanie nanotechnologii - stan obecny", ", 6. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO2013, Szczecin 2013
76. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Catalysis Research at the Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences", 6th Int. Annual Meeting 'Catalysis for Polluting Emissions Aftertreatment and Production of Renewable Energies', Groupement de Recherche International (GDRI CNRS-PAN), Wierzba 2013
77. W. Simka, M. Mosiałek, G. Nawrat, P. Nowak, L. Szyk-Warszyńska, J. Żak, A. Maciej, J. Szade, A. Winiarski "Anodic Oxidation of Ti-13Nb-13Zr Alloy", 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013
78. M. Skoczek, P. Batys, P. Weroński, E. Luchter-Wasylewska "Molecular Dynamics Simulations of High-Cholesterol Containing Membrane Vesicles", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
79. R. P. Socha, M. Szczepanik-Ciba, B. Strzelczyk, N. Spiridis, J. Wojas, J. Korecki "Utlenianie CO na odwrotnym modelowym katalizatorze MnO/Pt(111)", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
80. K. Sofińska, Z. Adamczyk, M. Nattich-Rak "Recombinant Human Serum Albumin (rHSA) Monolayers on Colloidal Carriers", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013
81. P. Sten, S. Engblom, S. Heikkilä, T. Andersson, P. Nowak "Toxic Metals and Acidity Generation by the Oxidation of Metal Sulfides Present in Soils - An Attempt of Prevention", Mineral Engineering Conf. MEC2013, Świeradów Zdrój 2013

82. A. Stępniewski, M. Radoń, P. Kozyra, J. Datka, E. Broclawik "Aktywność centrów Cu(I) i Cu(II) w zeolitach wobec NO: kanały przeniesienia elektronów w rozdzielczości orbitalnej i spinowej", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
83. M. Strojceki, M. Łukomski, Ł. Bratasz "Acoustic Emission as a New Tool for the Assessment of Microclimate Instability Impact on Wooden Art Objects", Joint Interim Conf. 'ICOM-CC Heritage Wood: Research & Conservation in the 21st Century', Warszawa 2013
84. M. Szaleniec "Biokatalityczna synteza alkoholi chiralnych", Life Science Open Space, Kraków 2013
85. M. Szaleniec, A. Dudzik, M. Tataruch, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "Alternatywne mechanizmy reakcji katalizowanych przez dehydrogenazę etylobenzenową - modelowanie DFT i badania chromatograficzne", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
86. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as a Drug Carriers", Joint COST Action CM1101 Meeting WG 3, WG 4, WG 5 'Synthesis, Kinetics and Catalytic Aspects of Biocolloids', La Valletta 2013
87. K. Szczepanowicz, M. Piotrowski, T. Kruk, K. Podgórna, P. Warszyński "Targeted Drug Delivery Systems Based on Polyelectrolyte Nanocapsules", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
88. A. Szymańska "Structural and Physicochemical Studies of Molybdenum Oxo-Peroxo and Oxo Complexes", 3. Warsztaty Naukowe ISD, Szczyrk 2013
89. M. Ślęzak, T. Giela, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, T. Ślęzak, M. Zając, M. Stankiewicz, N. Pilet, J. Raabe, C. Quitmann, J. Korecki "Prospects of X-Ray Photoemission Electron Microscopy at the First Beamline of Polish Synchrotron SOLARIS", 8th Int. Conf. Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice 2013
90. M. Tataruch, M. Szaleniec, A. Dudzik, J. Bryjak, P. Nowak, E. Luchter-Wasylewska, M. Witko, J. Heider "Biokatalityczna synteza chiralnych syntonów leków z wykorzystaniem immobilizowanych dehydrogenaz etylobenzenowej i fenyloetanolowej", Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013
91. M. Tataruch, M. Szaleniec, A. Dudzik, J. Bryjak, P. Nowak, W. Snoch, E. Luchter-Wasylewska, M. Witko "Chiralna synteza syntonów leków z wykorzystaniem dehydrogenazy etylobenzenowej i fenyloetanolowej", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
92. M. Tatko, M. Mosiałek, M. Dudek, A. Kwapisz, M. Boruta, E. Bielańska, G. Mordarski "Kompozytowy materiał katodowy Ag-La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.8}Fe_{0.2}O₃ do zastosowania w stałotlenkowych ogniwach paliwowych", 13th E-MRS Conf. on Composites and Ceramic Materials - Technology, Application and Testing. Białowieża 2013
93. M. Tatko, M. Mosiałek, M. Dudek, G. Mordarski, E. Bielańska, J. Wojewoda-Budka, A. Michna "Composite Cathode Material Ag-Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O₃ for Solid Oxide Fuel Cells", 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013

94. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu jako dodatkowy element w strukturze heteropolikwasów o geometrii Keggina", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
95. V.Ulaganathan, M.Krzan, M.Lotfi, S.S.Dukhin, K.Małyśa, R.Miller "Influence of β -Lactoglobulin and Its Surfactant Mixtures", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
96. P.Warszyński, "On the origin of the surface charge at water/air interface", COST CM1101 Workshop 'Dynamic and Liquid Interfaces', Potsdam-Golm 2013 Potsdam-Golm 2013
97. M.Zajac, A.Bianco, C.J.Bocchetta, E.Busetto, J.Korecki, K.Kubal, F.Melka, M.Ostoja-Gajewski, M.Sikora, M.J.Stankiewicz, Ł.Walczak, A.I.Wawrzyniak, K.Wawrzyniak, Ł.Żytniak "First Beamline at Solaris", 10. Krajowe Symp. Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego, Stalowa Wola 2013
98. J.Zawała, S.Dorbolo, N.Vandewalle, K.Małyśa "Immortal Mubbles - Effect of Interface Vibrations on Bubble Coalescence Time at Pure Water Surface", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
99. J.Zawała, E.Małyśa, M.Krzan, K.Małyśa "Monitoring of Contamination of Environmental and Industrial Waters Using the Bubble Velocity Measurements - Advantages and Limitations", Mineral Engineering Conf. MEC 2013, Świeradow Zdroj 2013
100. W.Ziemnicka, P.Wolski, A.Brzyńska, K.Woliński "Deformacje nanorurek węglowych w obecności sił zewnętrznych - symulacje kwantowo-chemiczne", Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013
101. P.Żeliszewska, A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk "Tuning Conformations and Stability of Fibrinogen Monolayers on Latex Particles", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
102. P.Żeliszewska, A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk "Mechanism of Human Fibrinogen Adsorption on Latex Particles", 8th Summer School for Graduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2013

POSTERY

1. M.Adamczak, E.Jarek, K.Szczepanowicz, C.Simon, P.Warszyński "Membrane Emulsification as a Method to Form Liquid Core Polyelectrolyte Microcapsules", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
2. C.J.Allpress, A.Milaczewska, T.Borowski, J.R.Bennet, D.Tierney, A.M.Arif, L.M.Berreau "Oxidative Aliphatic Carbon-Carbon Bond Cleavage Reactivity of a Copper(II) Chlorodiketonate Complex", Zinc Coordination Chemistry Conf. Playa del Carmen 2013
3. L.T.Baczewski, F.Stobiecki, J.Barnaś, T.Dietl, J.Korecki, A.Maziewski, T.Stobiecki, H.Szymczak "Research Infrastructure Realized in the Frame of EU Innovative Economy Project 'National Centre of Magnetic Nanostructures for Applications in Spin Electronics – SPINLAB' and Recent Scientific Results", E-MRS Fall Meeting, Warszawa 2013

4. K.A.Balin, A.Nowak, M.Wojtyniak, J.Szade, J.Korecki, M.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, C.Quitmann, J.Raabe, Z. Celiński "Magnetic Properties of Eu-Fe Thin Films", 12th Joint MMM Intermag Conf., Chicago 2013
5. K.A.Balin, J.Szade, M.Wojtyniak, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, J.Korecki, M.Ślęzak, Z.Celiński "Influence of Segregation of Divalent Europium on Magnetic and Transport Properties of MBE Grown Eu-Fe Thin Films", 10. Krajowe Symp. Użytkowników Promieniowania Synchrotronowego, Stalowa Wola 2013
6. P.Batys, P.Weroński "LbL Assemblies with Well-Defined Transport Properties - Numerical Studies", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
7. P.Batys, P.Weroński "Effect of Various Single-Layer Coverage on Nanoparticle Multilayer Properties", 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013
8. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar "Supported Noble Metal Catalysts for Hydrodechlorination of Organic Compounds: from the Choice of Preparation Method to Catalytic Properties", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
9. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T. Shishido, S.Dźwigaj "BEA Zeolite Modified with Iron as Effective Catalysts for N₂O Decomposition and Selective Reduction", 23rd North American Catalysis Society Meeting, Louisville 2013
10. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido, S.Dźwigaj "Role of Isolated Mononuclear Iron in Decomposition of N₂O and SCR of NO with Ammonia", 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013
11. T.Borowski "DFT Studies on Extradiol Ring Cleavage of 4-Nitrocatechol by Homoprotocatechuate 2,3-Dioxygenase (HPCD) - Effects of Metal Substitution", Int. Conf. on Bioinorganic Chemistry (ICBIC 16), Grenoble 2013
12. E.Broclawik, P.Kozyra, M.Radoń, A.Stępniewski, J.Datka "Electronic Propensity of Cu(II) / Cu(I) Sites in Zeolites to Activate NO: Spin- and Orbital-Resolved Cu-NO Electron Transfer", 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013
13. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Czynniki elektronowe w aktywacji NO przez centra Cu(I) i Cu(II) w zeolitach", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
14. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń, P.Kozyra, J.Datka "Electronic Propensity of Cu(II) / Cu(I) Sites in Zeolites to Activate NO: Spin- and Orbital-Resolved Cu-NO Electron Transfer", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013
15. K.Chruszcz-Lipska, E.Szczurek, T.Borowski, A.Jaworska, M.Barańska "R-Mevalonic Acid Studied by Raman Spectroscopy: Experiment and Theory", 14th Int. Conf. on Chiroptical Spectroscopy, Nashville 2013
16. A.Czapla, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Sole glinowa, galowa i indowa heteropolikwasu H₃PW₁₂O₄₀ jako katalizatory konwersji alkoholu etylowego w fazie gazowej", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013

17. K.Drabczyk, R.Socha, P.Panek, G.Mordarski "Electrodeposition of Thin Metallic Layer for Solar Cell Electrodes", 37th Int. Microelectronics and Packaging IMAPS-CPMT Poland Conf., Kraków 2013
18. A.Drelinkiewicz, Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Zięba, J.Stejskal "Transesterification of Triglycerides on Polyaniline Doped with Various Sulfonic Acids", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
19. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Oszajca, A.Franke, D.Rutkowska-Żbik, M.Brindell, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik "Theoretical Studies on Reactivity of Biomimetic Models for Compound II", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
20. A.Dudzik, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, N.Zawada, J.Kryściak-Czerwenka, M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider "Asymmetric Reduction of Prochiral Ketones to Chiral Alcohols Catalyzed by (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
21. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Zimowska, T.Machej, Ł.Mokrzycki . E.Bielańska, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Hydrotalcite Derived Cu-Mn-Al Catalysts for Combustion of Volatile Organic Compounds - A Synergy Effect upon Ce and Zr Addition", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
22. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Zimowska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, E.Bielańska, R.P.Socha, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Katalizatory tlenkowe Cu-Mn-Al-O otrzymane z prekursorów typu hydrotalkitu – wpływ domieszek Ce i Zr na aktywność w reakcji całkowitego utleniania etanolu", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
23. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz, A.Bukowska, W.Bukowski "Uwodornienie acetolu w obecności katalizatora rutenowego osadzonego na żywicy metakrylanowo-styrenowej", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
24. J.Dutkiewicz, E.Bielańska, J.Camra, I.Dukla , P.Kornelak, M.Najbar, A.Weselucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Tworzenie katalitycznie aktywnych warstw tlenkowych przez utlenianie folii ze stali kwasoodpornej", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
25. J.Dziedzic, K.Szczepanowicz, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic Decomposition of Organic Pollutants During the Simultaneous Application of TiO₂ and Oxidant", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
26. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Liquid-Phase Transformation of Terpenes over Dealuminated Natural Clinoptilolite from Slovakia", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon, 2013
27. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Naturalny, modyfikowany klinoptylolit jako katalizator w transformacji węglowodorów terpenowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013

28. S.Dźwigaj, J.-M.Krafft, P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido "SCR of NO with Ammonia and N₂O Decomposition on Fe-Single Site Zeolite Catalysts", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
29. K.Freindl, M.Zajac, N.Spiridis, T.Giela, M.Ślęzak, T.Ślęzak, J. Korecki "Oxygen Adsorption on Fe(110) Revisited", 8th Int. Conf. Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice 2013
30. M.Gackowski, M.Derewiński "Osadzanie nanokryształów zeolitu MFI na powierzchni makroporów monolitów krzemionkowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
31. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, M.Derewiński, P.Warszyński "Deposition of Zeolite Nanoparticles onto Silica Monolith", Int. Conf. on Advanced Complex Inorganic Nanomaterials ACIN 2013, Namur 2013
32. T.Giela, N.Spiridis, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "Au(111) Films on W(110) - Reconstruction, Dislocation and Adsorption of Co and Ag", 8th Int. Conf. Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice 2013
33. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, A.Drelinkiewicz, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul, E.Bielańska "A Metal Loading Effect on the Electrocatalytic Activity of Palladium - polyPyrrole Nanocomposite for Cathodic Reduction of Oxygen", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
34. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, A.Drelinkiewicz, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul, E.Bielańska "A Metal Loading Effect on the Electrocatalytic Activity of Palladium - Polypyrrole Nanocomposite for Cathodic Reduction of Oxygen", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
35. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Di-Oxo Monomers of Cr, Mo and W Adsorbed on Amorphous Silica. Periodic DFT Study", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
36. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Modelowanie monomerów Cr, Mo i W na powierzchni amorficznej krzemionki periodyczną metodą DFT", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
37. M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Krystalochemia związków kwasów dikarboksylowych z barem i strontem", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
38. M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania krystalochemiczne związków kwasów dikarboksylowych z barem i strontem", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013
39. M.Grzesiak-Nowak, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Crystallography of New Strontium Dicarboxylates", 28th European Crystallography Meeting, Coventry 2013

40. J.Handzlik, R.Gryboś, F.Tielens "Isolated Cr(VI) Oxide Species Supported on AlOx/SiO₂ - A Comparative Periodic and Cluster DFT Studies", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
41. J.Hartwich, B.Jachimska, A.Marczakiewicz, W.Drozd, M.Ryś, A.Skoczowski "Molecular Imaging of Lipoprotein Phenotype by Dynamic Light Scattering. Clinical Applications", 6th Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS'2013, Łochów 2013
42. A.Jagusiak, B.Piekarska, T.Pańczyk, P.Laidler "Complexes of Carbon Nanotubes and Self-Assembling Molecules of the Congo Red Type as Potential Drug Delivery Systems - Preliminary Report", 6. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO2013, Szczecin 2013
43. K.Jamroży, A.Michna, Z.Adamczyk "Kinetics of Fluorescent Latex Particle Deposition at PAH and PDADMAC Monolayers Determined by In situ Measurements", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
44. M.Jaworska, E.Sikora, K.Szczepanowicz, J.Ogonowski "Wpływ charakteru bazy emulsyjnej zawierającej kwas oleinowy na uwalnianie mentolu", Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013
45. M.Jaworska, E.Sikora, K.Szczepanowicz, J.Ogonowski "Wpływ rodzaju surfaktanta na fizykochemiczne właściwości nanoemulsji na bazie kwasu oleinowego", Forum-Innowacyjne Materiały, Lublin 2013
46. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz, E.Bieleńska "Kwasowe sole polianiliny w produkcji estrów metylowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
47. A.Karabas, M.Bzowska, J.Bereta, K.Szczepanowicz "In vitro Evaluation of Cytotoxic Effect of Polyelectrolyte Nanoparticles and Their Application as Drug Delivery System", 15th National Academic Seminar of Biotechnology Students & 5th Int. Conf. of Biotechnology Student, Wrocław 2013
48. A.Karabas, M.Bzowska, R.Mężyk-Kopeć, J.Bereta, K.Szczepanowicz "Analiza cytotoksyczności i przydatności cząstek jako system transportującego leki cytostatyczne", Międzyuczelniane Symp. Biotechnologiczne 'Symbioza', Warszawa 2013
49. A.Karabas, M.Bzowska, R.Mężyk-Kopeć, J.Bereta, K.Szczepanowicz "In vitro Analysis of Cytotoxic Effect of Nanoparticles on Tumor Cells", Student Scientific Conf. on Biotechnology and Biomedicine, Brno 2013
50. R.Karcz, R.Dula, J.Maciejewska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.M.Serwicka "Aktywność katalityczna soli kobaltowych kwasu fosforowolframowego i fosfomolibdenowego w reakcji utleniania cyklooktanu nadtlaniem wodoru", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
51. R.Karcz, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Mechanism of Cyclooctane Oxidation with Dioxygen in the Presence of Cobalt Heteropolysalts", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013

52. R.Karcz, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, D.Mucha, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Wpływ uwodnienia na skład fazowy soli kwasów $H_3PMO_{12}O_{40}$ i $H_3PW_{12}O_{40}$ z kationami dwuwartościowymi, na przykładzie jonu Co^{2+} ", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
53. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "The Influence of Different Ions on the Properties of Alginate Containing Multilayered Films", Workshop 'Nanostructurals Polymeric Systems', Kraków 2013
54. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Fourier Transform Infrared Spectroscopy Analysis of Casein Embedded into Multilayer Films", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
55. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Influence of Calcium Ions on the Buildup and Permeability of Multilayer Polymer Films", Bioelectrochemistry 2013. 12th Topical Meeting of Int. Soc. of Electrochem. & 22th Int. Symp. on Bioenergetics of Bioelectrochem. Soc., Bochum 2013
56. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "How Calcium Ions Influence the Formation of poly-L-Arginine/Alginate Multilayers ?", COST Action CM1101 WG2, WG3 & WG4 Meeting 'Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites', Szeged 2013
57. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Influence of Calcium Ions on the Buildup and Permeability of Alginate Containing Multilayer Films", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
58. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Effect of Crosslinking by Calcium Ions on the Buildup and Permeability of Alginate Containing Multilayer Films", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
59. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Wpływ jonów wapnia na powstawanie i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polimerowych zawierających alginian", 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013
60. A.Klimek, J.Dziadkowiec, M.Rogowska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, A.Gawęł, E.M.Serwicka, K.Bahranowski "Delaminacja kationowych i anionowych form minerałów warstwowych", Konf. Naukowo-Techniczna 'Sorbenty mineralne", Kraków 2013
61. D.Knack, N.Zawada, M.Szaleniec "Development of an Overproducing System for Steroid C25 Dehydrogenase - A Novel Molybdoenzyme Catalyzing Regioselective Oxidation of Cholesterol Derivates', 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013
62. D.Kosior, A.Niecikowska, J.Zawała, K.Małyś "Influence of Cationic Surfactant on Kinetics of the Three Phase Contact Formation at Mica and Teflon Surfaces", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
63. D.Kosior, A.Niecikowska, J.Zawała, K.Małyś "Influence of CTABr on Kinetics of the Bubble Attachment to Hydrophilic/Hydrophobic Surfaces", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013

64. R.Kosydar, M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz "The Effect of Support Properties in the Distribution of Pd-Nanoparticles in Catalysts Synthesized by 'Water-in-Oil' Microemulsion Method", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
65. M.Kozieł, M.Gryl, K.Stadnicka, W.Łasocha "Porównanie metod wyznaczania struktury krystalicznej z danych dyfrakcyjnych różnego pochodzenia", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013
66. P.Kozyra, M.Radoń, J. Datka, E.Broclawik "Spin-Resolved Analysis: NO on Cu(I) Site", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013
67. P.Kozyra, M.Świątek, J.Datka, E.Broclawik "Mechanism of Hydrogen Adsorption and Activation by Cu(I) and Ag(I) Sites in Zeolites: Energetic and Differential Electron Density Contributions", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
68. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, M.Kolasińska-Sojka, R.Wendelbo, P.Warszyński "Multilayer Functional Polyelectrolyte Films Formed with Reduced Graphene Oxide as a Base for Electroactive Sensors", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
69. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński, "Functional Multilayer Films Formed with Reduced Graphene Oxide", Conf. ImagineNano2013, Bilbao 2013
70. T.Kruk, K.Szczepanowicz, K.Kilan, P.Warszyński "The Modification of Polyelectrolyte Coatings for Biomedical Applications", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
71. T.Kruk, K.Szczepanowicz, D.Kręgiel, P.Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Thin Coatings with Antimicrobial Properties", Workshop 'Nanostructurals Polymeric Systems', Kraków 2013
72. T.Kruk, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, D.Kręgiel, P.Warszyński "Wielowarstwowe filmy polimerowe jako funkcjonalne powłoki", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
73. M.Krzak, K.Szczepanowicz, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński "Self-Healing Performance of the Water-Based Anticorrosive Epoxy Coatings Loaded with Inhibitor-Containing Polyelectrolyte Capsules", European Corrosion Congr. EUROCORR2013, Estoril 2013
74. M.Krzak, K.Szczepanowicz, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński, T.Hack "Polyelectrolyte Capsules Loaded with Corrosion Inhibitors for Self-Healing Performance of the Anticorrosive Water-Based Epoxy Coatings", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
75. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "New Development in Technology of Stable and Biodegradable Foam Generation - For Industrial and Biomedical Applications", 46th Biennial Meeting of the Colloid Society 'Morphological Transformations and Responses in Colloidal Systems', Paderborn 2013

76. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Silver Nanoparticles Adsorption on Solid Surfaces for Various Ionic Strengths", 15th JCF Fruhjahrssymposium, Berlin 2013
77. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Silver Nanoparticles Nonolayers Produced under Diffusion-Controlled Transport", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
78. M.Kujda, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, O.Bocheńska, G.Bras, A.Kozik, E.Bielańska, J.Barbasz "Antibacterial Properties of Charged-Stabilized Silver Nanoparticles", Federation of European Biochemical Societies Congr. 'Mechanisms in Biology' Sankt Petersburg 2013
79. A.Kupiec, E.Jarek, K.Szczepanowicz, M.Adamczak, P.Warszyński "Membrane Emulsification as a Method to Form Liquid Core Polyelectrolyte Microcapsules", Workshop 'Nanostructurals Polymeric Systems', Kraków 2013
80. Ł.Kuterasiński, M.Derewiński "Natura kwasowych centrów protonowych w zeolitach MFI izomorficznie podstawionych borem", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
81. M.Leżańska, A.Olejniczak, A.Pacula, J.Włoch, A.Kucińska, J.P.Łukaszewicz "Creaction of Microporosity in Highly Ordered Mesoporous N-Containing Carbons Obtained from Chitosan", 5th Czech-Italian-Spanish Conf. on Molecular Sieves and Catalysis, Segovia 2013
82. K.Luberda-Durnaś "Hybrid Organic-Inorganic Materials - Precursors of Semiconductors", Euro Nano Forum, Dublin 2013
83. K.Luberda-Durnaś "Hybrid Organic-Inorganic Materials of the Type $Zn_xCd_{1-x}Se(1,3-DAP)_{1/2}$ ", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
84. K.Luberda-Durnaś, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały typu $ZnS_xSe_{1-x}(1,3-DAP)_{1/2}$ ", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
85. W.Łasocha, W.Nitek, B.Gawel "Badania Strukturalne nowych polimolibdenianow 1,8-diaminooktanu", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
86. W.Łasocha, A.Szymańska, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania strukturalne nowych oktamolibdenianów alkiloanilinowych", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013
87. W.Łasocha, A.Szymańska, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Crystal Structure Studies of a few New Octamolybdates", 28th European Crystallographic Meeting, Coventry 2013
88. S.Łukasiewicz, E.Błasiak, K.Szczepanowicz, M.Dziedzicka-Wasylewska "D2-5-HT1A Receptor Heteromers as a New Target for Antipsychotic Drug Delivery", Conf. HTRF in Drug Discovery, Avignon 2013
89. S.Łukasiewicz, E.Fic, K.Szczepanowicz, M.Bzowska, P.Warszyński, M.Dziedzicka-Wasylewska "Targeting of Encapsulated Clozapine Specifically at D2-5-HT2A Heteromer", Federation of European Biochemical Societies Congr. 'Mechanisms in Biology' Sankt Petersburg 2013

90. S.Łukasiewicz K.Szczepanowicz, A.Stachowicz, M.Dziedzicka-Wasylewska "Polyelectrolyte Nanocapsules for the Selective Clozapine Delivery to D2-5HT1A Heteromers", 19th Int. Symp. on Microencapsulation, Pamplona 2013
91. L.Matachowski, E.Lalik, Ż.Kalemba-Jaje, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka, B.Gil "The Comparison of Catalytic Activity of Tungstophosphoric Acid as a Bulk and as an Epitaxial Monolayer", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
92. L.Matachowski, E.Lalik, Ż.Kalemba-Jaje, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka, B.Gil "The Comparison of Catalytic Activity of Tungstophosphoric Acid as a Bulk and as an Epitaxial Monolayer", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
93. A.Michna, Z.Adamczyk "Characterization of PDADMAC Monolayers on Mica by Streaming Potential Measurements", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
94. A.Michna, Z.Adamczyk "Bulk and Monolayer Properties of poly(Diallyldimethylammonium chloride) (PDADMAC) Determined by DLS, and Electrokinetic Measurements", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
95. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Morga, K.Kubiak "The Kinetics of Deposition of Silver Nanoparticles at PDADMAC Monolayers", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
96. A.Michna, M.Cieśla, J.Barbasz "Deposition of Bimodal Particles on Mica", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
97. A.Mińczewska, T.Borowski "Insight into a Reaction Mechanism of Acireductone Dioxygenation - DFT Studies for a Model System", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013
98. A.Mińczewska, E.Broclawik, T.Borowski "On the Catalytic Mechanism of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase (HPPE). A Hybrid DFT Study", Gordon Research Seminar on Bioinorganic Chemistry, Ventura 2013
99. A.Mińczewska, P.Porębski, E.Niedziałkowska, K.L.Tkaczuk, M.Chruszcz, W.Minor, T.Borowski "Studies on the Structure and Functioning of Acireductone Dioxygenases", Gordon Research Seminar on Bioinorganic Chemistry, Ventura 2013
100. A.Mińczewska, P.Porębski, K.L.Tkaczuk, M.Chruszcz, W.Minor, T.Borowski "Acireductone Dioxygenation - Structural and Computational Studies", Int. Conf. on Bioinorganic Chemistry ICBIC 16, Grenoble 2013
101. E.Młynczak, A.Koziół-Rachwał, B.Matlak, J.Gurgul, T.Ślęzak, N.Spiridis, J. Korecki "Fe/CoO(001) and Fe/CoO(111) Bilayers: Crystalline Structure, Stoichiometry and Exchange Bias", Interdisciplinary Surface Science Conf. ISSC-19, Nottingham 2013
102. Ł.Mokrzycki, T.Machej, E.Bielańska, E.Serwicka-Bahranowska "Mixed Oxides CuO-CeO₂ Catalysts for Total Oxidation of Volatile Organic Compounds (VOC) Prepared by 'One-Step' Synthesis", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013

103. G.Mordarski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, K.Samson, M.Mosiąlek, D.Rutkowska-Żbik "Katalityczne własności materiałów elektrodowych stosowanych w jednokomorowym wysokotemperaturowym ogniwie paliwowym ze stałym elektrolitem tlenkowym (SC SOFC)", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
104. M.Morga, Z.Adamczyk "Electrokinetic Studies of Cationic Polyelektrolyte Monolayers on Mica", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
105. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Silver Particle Monolayers and Bilayers on Solid Surfaces", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
106. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Streaming Potential Studies of α -Fe₂O₃/Ag Bilayers on Mica", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
107. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Silver Particle Monolayers on Solid Surfaces: Electrokinetic Studies", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
108. M.Mosiąlek, G.Mordarski, P.Nowak, M.Krzak "Conversion Coatings on Magnesium Alloys: EIS and SEM Studies", European Corrosion Congr. EUROCORR2013, Estoril 2013
109. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska, M.Cieśla "Fibrinogen Monolayers of Controlled Coverage and Conformations for Biosensing Applications", 3rd Int. Conf. on Materials and Applications for Sensors and Transducers, Prague 2013
110. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Polystyrene Latex Particles Revealed by Electrokinetic, AFM and SEM Measurements", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
111. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Wasilewska "Mechanism of Fibrinogen Adsorption Determined by AFM, Streaming potential and Colloid Deposition", COST Action CM1101 WG2, WG3 & WG4 Meeting 'Functionalized Surfaces and Nanobiocomposites', Szeged 2013
112. A.Niecikowska, M.Krasowska, J.Ralston, K.Małyś "The Wetting Film Drainage and Rupture at Titania Surfaces of Different Hydrophobicity", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
113. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Wstępne obliczenia procesu aktywacji cząsteczki O₂ na modyfikowanych HPA", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
114. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Obliczenia struktury elektronowej heteropolikwasów molibdenowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
115. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Cyclic Voltammetry as an Efficient Tool for Characterization of Nanoparticle Films", 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013

116. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Application of Cyclic Voltammetry Technique for Characterization of Nano- and Microsphere Monolayers", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
117. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, G.Mordarski "Voltammetric Method for Determining Coverage of Densely Packed Spherical Particle Monolayer - Experimental View", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
118. M.Nosek, P.Weroński, P.Batys, E.Bielańska "Effect of Particle Polydispersity on Limiting Diffusion Current", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
119. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Kinetics of Silver Nanoparticle Release from Monolayers - Influence of Size, Ionic Strength, pH and Temperature", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
120. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Self-Assembled Silver Nanoparticles Monolayers on PAH-Covered Mica - AFM, SEM and Electrokinetic Characteristics", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
121. J.Olszówka, R.Dula, R.Karcz, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.Serwicka-Bahranowska "Utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu wodą utlenioną w obecności katalizatorów hydrotalkitowych zawierających Sn", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
122. K.Onik, J.Podobiński, E.Bielańska, M.Derewiński "Mesoporous Layer Materials Containing Highly Dispersed Protozeolitic Clusters - Effective Catalysts for Liquid Phase Conversion of Terpene Hydrocarbons", 17th Int. Zeolite Conf., Moscow 2013
123. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Izomeryzacja α -pinenu wobec nowych materiałów warstwowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
124. M.Oszajca, W.Łasocha "Zastosowanie danych synchrotronowych w udokładnianiu struktur z użyciem funkcji PDF", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013
125. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Zimowska, D.Mucha "Electroreduction of Oxygen and Hydrogen Peroxide over the Composites Containing Cobalt Nanoparticles Embedded in N-Doped Carbon Nanotubes", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
126. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "Multilayer Films with Reduced Graphene Oxide as a Base for Sensor Layers", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
127. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński, "Multilayer Polyelectrolyte Films Formed with Prussian Blue Nanoparticles and Reduced Graphene Oxide as a Sensitive Tool for H₂O₂ Detection", Conf. ImagineNano2013, Bilbao 2013
128. K.Pamin, R.Karcz, J.Połtowicz, J.Kryściak, Ł.Kolcz "Catalytic Activity of Metallophthalocyanines in Oxidation of Phenol in Glycerol", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013

129. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, W.Zieliński, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński, "Surface Properties of Esterquat and Diesterquat Surfactants - Effect of Molecular Structure and Hydrolysis", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
130. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, W.Zieliński, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Effect of Ester Group as Spacer on Surface Properties of Chemodegradable Cationic Surfactants", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013
131. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, W.Zieliński, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Surface Properties of Esterquat Surfactants - Effect of Molecular Structure and Hydrolysis", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013
132. M.Paszek, A.Micek-Ilnicka, B.Gil "Aktywność katalityczna zeolitów MWW: MCM-22, MCM-56 i MCM-49 w reakcji konwersji etanolu", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
133. W.Paszkowicz, W.Łasocha, W.Nitek, P.Piszora, Y.Cerenius, S.Carlson, B.Bojanowski, H.Dąbkowska "Structure Refinement of SmVO₄ at Pressures Ranging to 10 GPa", 28th European Crystallography Meeting, Coventry 2013
134. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-Core and Polyelectrolyte-Coated Nanocarriers for Neuroprotective Drugs", 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013
135. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Nanocapsules for Neuroprotective Drugs: Synthesis and Evaluation of Chemical and Pharmacological Properties", 19th Int. Symp. on Microencapsulation, Pamplona 2013
136. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Polyelectrolyte Coated Nanocapsules as Neuroprotective Drug Delivery System", Workshop 'Nanostructurals Polymeric Systems', Kraków 2013
137. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Leśkiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-Core and Polyelectrolyte-Shell Nanocapsules: Biocompatibility and Neuroprotection", Conf. Nanomedicine, Barcelona 2013
138. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Leśkiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Kapsułki z powłokami polielektrolitowymi jako nano-systemy dostarczania leków neuroprotekcyjnych", 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013
139. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "A Fast, Metadynamics-Based Method for Prediction the Stereochemistry-Dependent Relative Free Energies of Ligand-Receptor Interactions", 8th Joint Meeting on Medicinal Chemistry, Lublin 2013
140. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates: QM/MD Study", 3rd Molecular Materials Meeting M3, Singapore 2013
141. W.Płaziński, M.Drach "Carbohydrate Ring Puckering: Transition Path Sampling Study", 2nd Annual CCP-BioSim Conf. 'Frontiers of Biomolecular Simulation', Nottingham 2013

142. W. Płaziński, M. Drach "Carbohydrate Ring Puckering: Transition Path Sampling Study", Conf. 'Frontiers in Dynamics Simulations of Biological Molecules', Barcelona 2013
143. K. Podgórna, A. Dudzik, K. Szczepanowicz, W. Snoch, M. Szaleniec, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Entrapment of (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase (PEDH) and E. coli Cells in Alginate Gel", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
144. K. Podgórna, A. Dudzik, K. Szczepanowicz, M. Szaleniec, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Preparation of Alginate Gel Beads for Immobilization of (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase (PEDH) and E. coli Cells", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
145. K. Podgórna, A. Dudzik, K. Szczepanowicz, M. Szaleniec, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Preparation of Calcium Alginate Hydrogels as Carriers of Biological Catalysts and Microorganisms", Workshop 'Nanostructurals Polymeric Systems', Kraków 2013
146. J. Połtowicz, R. Karcz, K. Pamin, E. M. Serwicka "Removal of Allochthonic Compounds in the Presence of Cationic and Anionic Metallocomplexes", 11th European Congr. on Catalysis EuroCat-11. Lyon 2013
147. M. Radoń, J. Szklarzewicz, E. Brocławik "Iron Spin-State Energetics of Biologically Relevant Complexes from DFT and Couples Cluster Calculations", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013
148. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak-Nowak, D. Sarkowicz, W. Łasocha "Badania pigmentów z obrazów Henryka Siemiradzkiego", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013
149. J. Rakoczy, B. Sulikowski, K. Czajka "Interrelationships between Coke Deposits in Faujasite, Mordenite and ZSM-5 and Shape-Selectivity in Alkylation and Isomerization Reactions", 5th Int. Symp. on Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Golden Sands 2013
150. B. M. Rocha Martins, D. Snihirova, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Smart Water Based Epoxy Coatings Containing Inhibitor Filled Nanocapsules for Corrosion Protection of AA2024", European Corrosion Congr. EUROCORR2013, Estoril 2013
151. A. Rugor, S. Mordalski, J. Staroń, A. Bojarski, M. Szaleniec "Steroid C25 Dehydrogenase – Homology Modeling and Substrate Spectrum", 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013
152. A. Rugor, S. Mordalski, J. Staroń, A. Bojarski, M. Szaleniec "Substrate Docking to Steroid C25 Dehydrogenase. Homology Model vs. Enzyme Substrate Spectrum", 5th Central European Congr. of Life Science, EUROBIOTECH 2013, Kraków 2013
153. A. Rugor, S. Mordalski, J. Staroń, M. Tataruch, A. Bojarski, M. Szaleniec "Pozyskiwanie bakteryjnego katalizatora dehydrogenazy C-25 steroidowej i synteza 25-hydroksysteroli", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
154. A. Rugor, M. Szaleniec, A. Bojarski, M. Witko "Zastosowanie bakteryjnej dehydrogenazy C-25 steroidowej do syntezy 25-hydroksycholesterolu" 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013

155. A.Rugor, M.Szaleniec, A.Bojarski, M.Witko "Aerobic Purification of Oxygen Sensitive Steroid C-25 Dehydrogenase - First Step to Synthesis of Pharmaceuticals", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
156. D.Rutkowska-Żbik "Nanotechnology Research at the Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences", Euro Nano Forum, Dublin 2013
157. D.Rutkowska-Żbik, M.Świrski, Ł.Orzeł, M.Witko, G.Stochel "Transmetallation of Chlorophylls: DFT Studies", Conf. Modeling Interactions in Biomolecules VI, Marianske Lazne 2013
158. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, Ł.Orzeł, M.Romanowska, G.Stochel "Mechanizm otrzymywania metaloporfiryn w reakcji transmetalacji", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
159. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Aromatyzacja metanu na MoO₃/ZSM-5: badania nad mechanizmem reakcji", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
160. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Morga, M.Oćwieja, E.Bielańska "Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica: Characterization by Colloid Deposition", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
161. K.Samson, M.Śliwa, R.Grabowski, D.Mucha, J.Mizera, M.Ruggiero, D.Rutkowska-Żbik, W.Rojek, M.Lachowska "Synthesis and Physicochemical Characterizations of CuO/Chromites Based Catalysts in Selective Hydrogenolysis of Glycerol", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
162. K.Samson, M.Śliwa, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.Mizera, D.Mucha, A.Kornas, M.Madej-Lachowska "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna katalizatorów do reakcji hydrogenolizy glicerolu, zawierających aktywną fazę miedziową na nośnikach chromitowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
163. W.Simka, M.Sowa, R.P.Socha, J.Michalska, G.Dercz, A.Krzakała "Modification of Niobium Surface via Plasma Electrolytic Oxidation in Silicate Solutions", 6th Kurt Schwabe Symp., Kraków 2013, poster, p. 77
164. W.Simka, M.Sowa, R.Socha, J.K.Michalska, A.Krzakała "Anodic Oxidation of Tantalum in Silicate Solutions", Bioelectrochemistry 2013. 12th Topical Meeting of Int. Soc. of Electrochem. & 22th Int. Symp. on Bioenergetics of Bioelectrochem. Soc., Bochum 2013
165. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "High-Cholesterol-Induced Modifications in Phospholipid Bilayers: a Simulation Study", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry CTTC-VI, Kraków 2013
166. M.Skoczek, M.Nosek, T.Piecha, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Rotating Disk Electrode Voltammetry Measurements of Prostate Self-Fusion: an Experimental View", 3rd Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2013

167. M.Skoczek, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska, P.Batys "Struktura błony prostasomu - symulacje komputerowe", 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013
168. K.Sofińska, Z.Adameczyk "Monowarstwy HSA na powierzchni lateksów polistyrenowych", 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013
169. K.Sofińska, M.Nattich-Rak, Z.Adameczyk "Recombinant Human Serum Albumin (rHSA) Monolayers on polyStyrene Latex Particles", Int Soft Matter Conf., Rome 2013
170. K.Sünwoldt, D.Knack, J.Heider "New Reactions in Anaerobic Alkane and Alkene Metabolism", 2013 VAAM Int. Conf. on Microbiology, Bremen 2013
171. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Tataruch, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, J.Bryjak, M.Witko, J.Heider "Application of Immobilized Ethylbenzene Dehydrogenase and Whole-Cell Recombinant Phenylethanol Dehydrogenase System for Synthesis of Chiral Alcohols", 5th Central European Congr. of Life Science, EUROBIOTECH 2013, Kraków 2013
172. M.Szaleniec, A.Dudzik, T.Borowski, D.Knack, J.Heider, M.Witko "Mechanistic Basis for Anaerobic Enantioselective Hydroxylation and Oxidative Dehydrogenation by Ethylbenzene Dehydrogenase", 2013 Molybdenum & Tungsten Enzymes Conf., Sintra 2013
173. M.Szaleniec, A.Dudzik, W.Snoch, M.Tataruch, D.Knack, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko "Modelowanie reaktywności enzymatycznej za pomocą sieci neuronowych", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
174. M.Szczepanik-Ciba, R.P.Socha, B.Figarska, E.Madej, N.Spiridis, J.Korecki "Synteza, charakterystyka i właściwości katalityczne mieszanych tlenków manganu i żelaza na MgO(001)", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
175. M.Szczepanik-Ciba, R.Socha, N.Spiridis, B.Figarska, E.Madej, J. Korecki "Synthesis and Properties of Epitaxial Mixed Fe-Mn Oxides on MgO(100)", Interdisciplinary Surface Science Conf. ISSC-19, Nottingham 2013
176. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as a Anticancer Drug Carriers", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013
177. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as a Anticancer Drug Carriers", Conf. Nanomedicine, Barcelona 2013
178. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Shell Nanocapsules with Emulsion Core as Carrier of Anticancer Drugs", 19th Int. Symp. on Microencapsulation, Pamplona 2013
179. A.Szymańska, M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha "Badania strukturalne związków kadmu z symetrycznymi aminami", 55 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2013

180. A.Szymańska, W.Nitek, W.Łasocha "Badania strukturalne nowych polimolibdenianów 4-etyloaniliny", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
181. A.Szymańska, K.Pamin, R.Karcz, J.Połtowicz, W.Łasocha "Molybdenum Oxo-Diperoxo and Oxo Complexes as Catalysts for the Oxidation of Cyclooctane with Molecular Oxygen", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
182. A.Szymańska, K.Pamin, J.Połtowicz, R.Karcz, W.Łasocha "Oxo-Molybdate Complexes as Catalysts for the Oxidation of Cyclooctane with Molecular Oxygen", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
183. M.Tataruch, M.Szaleniec, J.Bryjak, J.Opalińska-Piskorz, E.Luchter-Wasylewska, M.Witko, J.Heider "Immobilizowane dehydrogenazy jako narzędzia do biosyntezy chiralnych syntonów leków", 3. Konf. Doktorantów Wydziału Lekarskiego i Farmaceutycznego Collegium Medicum UJ, Kraków 2013
184. M.Tataruch, M.Szaleniec, J.Opalińska-Piskorz, P.Nowak, J.Bryjak, M.Witko, E.Luchter-Wasylewska "Wpływ immobilizacji na poprawę stabilności operacyjnej dehydrogenazy etylobenzenowej", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
185. M.Tatko, M.Mosiąlek, E.Bieleńska, D.Mucha "Catalytic Reduction of Oxygen on Composite Material $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3\text{-Ag}$ ", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
186. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu Ion as an Additional Element in Keggin Anion. DFT Cluster Calculations of Modified Cu-HPA", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry CTTC-VI, Kraków 2013
187. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Influence of Cu Position in Keggin Anion on Physicochemical Properties of Modified Cu-HPA", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
188. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Preliminary Calculations of O_2 Activation on Modified Heteropolyacids", Conf. Introduction to Gaussian: Theory and Practice, Wrocław 2013
189. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Modelling of O_2 Activation on Modified Heteropolyacids", European Summer School in Quantum Chemistry, Palermo 2013
190. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Wpływ położenia jonu Cu, w anionie Keggina, na obraz struktury elektronowej heteropolikwasów wolframowych. Obliczenia klasterowe DFT", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
191. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oddziaływanie HPW modyfikowanych Co z ugrupowaniami tlenowymi reaktywnymi w procesach utleniania", 56. Zjazd PTChem i SITPCh, Siedlce 2013
192. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Theoretical Studies on Formation of Active Phase and Reaction Mechanism of Methane Aromatization on $\text{MoO}_3/\text{ZSM-5}$ ", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013

193. J.Vit, R.Dula, A.Michalik-Zym, D.Mucha, R.P.Socha, M.Śliwa, R.Grabowski, E.M.Serwicka "Zirconium and Gallium as Promoters of Hydrotalcite Derived Cu/ZnO/Al₂O₃ Catalyst for the Conversion of CO₂ to Methanol", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
194. P.Weroński, P.Batys, M.Nosek "Voltammetric Method for Determining of Densely Packed Spherical Particle Monolayer - Theoretical Study", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
195. K.A.Wilk, U.Bazylińska, J.Kulbacka, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "ROS-Induced Apoptosis of Human Melanoma Cells Using Biocompatible Polyelectrolyte Nanocapsules as a Carrier of Cyanine-Type Photosensitizer", Federation of European Biochemical Societies Congr. 'Mechanisms in Biology' Sankt Petersburg 2013
196. T.Wilkosz, E.Bielańska, J.Camra, I.Dukla, J.Dutkiewicz, P.Kornelak, M.Kozicki, M.Najbar, A.Wesółucha-Birczyńska "Wpływ powinowactw do tlenu i temperatur parowania metali wchodzących w skład folii ze stali kwasoodpornej na fizykochemiczne własności tworzących się na niej warstw tlenkowych", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
197. W.Włodarczyk, A.Michalik-Zym, E.Wisła-Walsh, A.Klimek, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Dializa jako metoda zwiększania powierzchni właściwej sodowej formy montmorillonitu i pochodnych nanostruktur", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
198. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of Cushion Material and Preparation Conditions on the Formation of Supported Lipid Bilayers", 14th European Student Colloid Conf., Potsdam-Golm 2013
199. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of Solid Surface Modification on the Formation of Supported Lipid Bilayers", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
200. P.Wolski, A.Brzyńska, K.Woliński "Podwójna baza funkcyjna w obliczeniach elektrycznych i magnetycznych właściwości molekularnych", 30. Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej SPTChem, Przewież 2013
201. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Reaction Specificity of HMS and HPPD - Insights from Computational Studies", Gordon Research Seminar on Bioinorganic Chemistry, Ventura 2013
202. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Reaction Specificity of HMS and HPPD - Insights from Computational Studies", Int. Conf. on Bioinorganic Chemistry (ICBIC 16), Grenoble 2013
203. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Reaction Specificity of HMS and HPPD - Insights from Computational Studies", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry VI, Kraków 2013

204. N.Zawada, A.Rugor, M.Tataruch, D.Knack, M.Szaleniec "Bacterial Steroid C-25 Dehydrogenase - A Novel Biocatalyst for Regioselective Hydroxylation of Steroid Compounds", 5th Central European Congr. of Life Science, EUROBIOTECH 2013, Kraków 2013
205. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Kinetics of the Bubble Collisions at Hydrophilic Fritted Glass with Controlled Air Presence - Experiments and Numerical Simulations", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013
206. J.Zawała, K.Podgórna, K.Szczepanowicz, A.Kupiec, Sz.Wojtyła, P.Warszyński "The Drop Size in Membrane Emulsification: Theoretical and Experimental Studies", 4th Int. Conf. on Colloid Chemistry and Physicochemical Mechanics, Moscow 2013
207. W.Ziemnicka, A.Brzycka, K.Woliński "Modelowanie wpływu efektów rozpuszczalnikowych na magnetyczne stałe ekranowania jąder azotu w cząsteczkach azoli", 30. Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej SPTChem, Przewięź 2013
208. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "FTIR and MAS NMR (²⁷Al, ²⁹Si) as Complementary Methods in the study of Aluminated Porous Heterostructures (PCH) Derived from Laponite", 15th Int. Clay Conf., Rio de Janeiro 2013
209. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "Komplementarność metod FTIR i MAS NMR (²⁷Al, ²⁹Si) w zastosowaniu do badania aluminacji porowatych heterostruktur typu PCH na podstawie Laponitu", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
210. A.Żelazny, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Synthesis and Physico-chemical Characterization of Ag-Cu/Al₂O₃ and Ag-Cu/TiO₂ Catalysts for Glycerol Hydrogenolysis", 16th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC-16, Sapporo 2013
211. A.Żelazny, M.Śliwa, R.Grabowski, M.Ruggiero, K.Samson, D.Rutkowska-Żbik, Ł.Mokrzycki, T.Machej "Role of the Modification of the Metallic and Acidic Components in the Catalysts for One Stage DME Synthesis from Syngas", 11th European Congr. on Catalysis EuropaCat-11. Lyon 2013
212. A.Żelazny, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów Ag-Cu/Al₂O₃ do hydrogenolizy glicerolu", 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2013
213. P.Żeliszewska, A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk "Electrokinetic and AFM Studies of Fibrinogen Adsorption on Colloid Particles", Federation of European Biochemical Societies Congr. 'Mechanisms in Biology' Sankt Petersburg 2013
214. P.Żeliszewska, A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk "Electrokinetic and AFM Studies of Fibrinogen Adsorption on Colloid Particles", 27th Conf. of European Colloid and Interface Soc. ECIS, Sofia 2013

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. A.Bielański "Chemia wśród innych nauk", Stowarzyszenie Doktorantów Wydziału Chemii UJ
2. A.Bielański "150 lat układu okresowego pierwiastków", Uniwersytet Otwarty AGH
3. A.Bielański "150 lat układu okresowego pierwiastków", Polskie Stowarzyszenie Wodoru i Ogniw Paliwowych
4. T.Borowski "Molecular Modeling for Metalloenzymes", Dept. of Chemistry and Biochemistry, University of South Carolina, Columbia 2013
5. Ł.Bratasz "Klimat historyczny", Wydział Chemii UJ
6. Ł.Bratasz "Ogrzewanie budowli zabytkowych", Wydział Architektury, Politechnika Krakowska
7. Ł.Bratasz "Przegląd wytycznych konserwatorskich", Narodowy Instytut Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów
8. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Nitric Oxide as a non-Innocent Ligand in (Bio-)Inorganic Complexes: Charge Transfer Resolution", Donostia International Physics Center, San Sebastian 2013
9. M.Derewiński "Hierarchical Porous Materials – From Fundamental Research to Applications", Pacific Northwest National Laboratory, Richland 2013
10. D.Knack "Development of a Recombinant Production System for Molybdenum Hydroxylases", Instytut Fizjologii Roslin, PAN, Kraków
11. J.Korecki "LEEM - mikroskopia elektronowa na niskoenergetycznych elektronach, czyli jak obrazować powierzchnie 'na żywo' z rozdzielczością nanometrową", Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH
12. J.Korecki "Spektro-mikroskopia z użyciem miękkiego promieniowania X w SOLARIS", Wydział Chemii UJ
13. R.Kozłowski "Roman Cements for Architectural Restoration to New, High Standards - The ROCARE Project", Meeting of EC Cluster 'Nano and Advanced Materials for Cultural Heritage', Brussels 2013
14. W.Łasocha "Krystalografia a sztuka. Część I", Akademia Sztuk Pięknych, Kraków
15. M.Łukomski "Energooszczędne zarządzanie klimatem w muzeach", Muzeum Narodowe w Krakowie
16. M.Łukomski "Energooszczędne zarządzanie klimatem w muzeach", Narodowy Instytut Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów

17. M.Łukomski "Zarządzanie dziedzictwem kultury - wyzwanie dla nauk ścisłych", Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych i Medycznych IFJ PAN
18. T.Pańczyk "A Magnetically Controlled Nanocontainer as a Drug Delivery System: Molecular Dynamics Simulations", Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste

WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. E.Bielańska, "Elektronowa mikroskopia skaningowa: wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (2 godz.)
2. T.Borowski "Chemia obliczeniowa w bioinformatyce", Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ (2 godz.)
3. E.Broclawik "Chemia fizyczna II", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (14 godz.)
4. E.Broclawik "Chemia kwantowa makromolekuł", Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ (30 godz.)
5. E.Broclawik "Metody Obliczeniowe chemii kwantowej", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (4 godz.)
6. E.Broclawik "Metody obliczeniowe badań fizykochemicznych", wykład dla słuchaczy Studium Doktoranckiego ISD (AGH) (8 godz.)
7. M.Derewiński "Postawy spektroskopii IR i Ramana", (wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (4 godz.)
8. M.Derewiński "Podstawy spektroskopii IR i Ramana", wykład dla słuchaczy Studium Doktoranckiego ISD (AGH) (4 godz.)
9. A.Drelinkiewicz "Elementy termodynamiki", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (20 godz.)
10. R.Grabowski "Adsorpcja", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego
11. J.Gurgul "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego
12. J.Korecki "Promieniowanie synchrotronowe i jego zastosowania", wykład dla słuchaczy Studium Doktoranckiego ISD MOLMED
13. J.Korecki "Wybrane zagadnienia i metody współczesnej fizykochemii", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego

14. W.Łasocha "Metody krystalografii w katalizie", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (4 godz.)
15. P.Nowak "Elektrochemia", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego
16. W.Płaziński "Zastosowanie dynamiki molekularnej do symulacji biomolekuł", wykład dla słuchaczy Studium Doktoranckiego ISD MOLMED (2 godz.)
17. B.Sulikowski "Novel Porous Materials. Zeolites and Related Materials: From Fundamentals to Applications", wykład dla słuchaczy Studium Doktoranckiego ISD (AGH) (15 godz.)
18. B.Sulikowski "Wstęp do spektroskopii NMR", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (2 godz.)
19. M.Szaleniec "Zastosowanie technik chromatograficznych w badaniach przyrodniczych", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego
20. P.Warszyński "Chemia Fizyczna", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego (12 godz.)

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. J.Dąbrowski "Halogenowe pochodne bakteriochloryn w terapii fotodynamicznej nowotworów - od syntezy do badań klinicznych"
2. T.Z.Majkowski "Aboś my to jacy tacy: ideologia narodowa i życie codzienne" [wykład Wiekanocny]
3. V.C.Niculescu "Catalytic Properties of Transition Metals in Silica Meso Space"
4. P.E.M.Siegbahn "The Mechanism for Water Oxidation in Photosystem II"
5. V.Ueda "New Porous Mo-Based Complex Metal Oxide Crystals as High-Performance Heterogeneous Oxidation Catalyst"
6. E.Wieleżyńska "Mity i przesady na temat wina" [wykład Bożonarodzeniowy]

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. E.Brocławik "Aktywność redoksowa i rodnikowa tlenku azotu (II) w kompleksach (bio-)nieorganicznych: analiza kanałów przepływu ładunków w rozdzielczości spinowej"
2. A.Drelinkiewicz, A.Pacuła "Kataliza w procesach utleniania - przegląd tematyki badawczej na podstawie wybranych konferencji międzynarodowych w latach 2004-2013"
3. B.Grzybowska-Świerkosz "Kataliza w reakcjach utleniania: tematyka badawcza 1965-2013"

4. J.Korecki "Pierwsza linia pomiarowa synchrotronu SOLARIS"
5. R.Kozłowski "Nasze publikacje - ocena KEJN za lata 2009-2012 - w stronę roku 2017"
6. D.Kosior "Kinetyka i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach hydrofobowych"
7. W.Łasocha, A.Szymańska "Wybrane polioksometalany i peroksokompleksy. Struktura i własności fizykochemiczne"
8. A.Mińczewska "Mechanizm działania i struktura wybranych metaloenzymów niehemowych"
9. E.Młynczak "Właściwości powierzchni i interfejsów w magnetycznych nanostrukturach metal-tlenek"
10. M.Mosiąlek "Wysokotemperaturowe ogniwa paliwowe"
11. P.Nowak "Korozja i ochrona przed korozją - badania prowadzone w IKiFP PAN"
12. A.Pacuła "Elektroaktywne kompozyty zawierające nanostruktury węgla i związki metali przejściowych"
13. A.Pomianowski "Ewolucja 'naszego Wszechświata' wedle Plancka i Hawkinga"
14. D.Rutkowska-Żbik "Kataliza w ochronie przyrody - główne kierunki badań"
15. D.Rutkowska-Żbik "Leki antynowotworowe nowej generacji: układ hybrydowy kobalamina - cis-platyna"
16. M.Szaleniec "Zastosowanie dehydrogenazy (S)-1-fenyletanolowej do syntezy chiralnych alkoholi drugorzędowych"
17. K.Szczepanowicz "Wcelowane dostarczanie leków"

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. J.Barbasz "Małe jest wielkie - czyli o technologiach 'nano', które zdominowały świat"
2. Ł.Bratasz "Cement Romański - czyli z czego Kraków zbudowano"
3. E.Jarek "Nanochemia - świat, w którym powierzchnia jest najważniejsza"
4. D.Rutkowska-Żbik "Magia dotyku - jak działają ekrany dotykowe"
5. M.Szaleniec "Czekoladowa Chemia"

UPOWSZECHNIANIE NAUKI

1. T.Borowski, Warsztaty olimpijskie dla młodzieży licealnej, Wydział Chemii UJ (4 godz.)
2. Pokazy chemiczne w Kangurowym Przedszkolu, ul. Hofmana 9, Kraków (R.Dula)

UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

PROFESORA

1. A.Drelinkiewicz

DOKTORA HABILITOWANEGO

1. J.Barbasz "Procesy adsorpcji na obiektach o skończonych rozmiarach"
2. Ł.Bratasz "Fizyczna odpowiedź drewna polichromowanego na fluktuacje parametrów środowiska" (AGH)
3. N.Spiridis "Struktura powierzchni i właściwości elektronowe metalicznych i tlenkowych nanoukładów epitaksjalnych" (UŚI)
4. M.Szaleniec "Badania mechanizmu i enancjoselektywności reakcji oraz modelowanie reaktywności dehydrogenazy etylobenzenowej zaawansowanymi metodami eksploracyjnej analizy danych. Badania eksperymentalne i teoretyczne"

DOKTORA

1. M.Adameczak "Surfactants, Polyelectrolytes and Nanoparticles as Building Blocks for Nanocarriers" (promotor P.Warszyński)
2. M.Dąbkowska "Mechanisms of Irreversible Adsorption of Nanoparticles and Proteins on Solid Surfaces Determined by Electrokinetic Investigations and AFM Microscopy" (promotor Z.Adamczyk)
3. K.Freindl "Adsorpcja tlenu i wczesne fazy utleniania powierzchni i nanostruktur Fe(110)" (promotor J.Korecki) (AGH)
4. D.Kosior "Nanostructures and stability of thin liquid layers" (promotor K.Małyś)
5. K.Luberda-Durnaś "Hybrid Organic-Inorganic Layered Materials, Precursors of Semiconducting Nanostructures" (promotor W.Łasocho)
6. E.Młyńczak "Surface and Interface Properties of Metal-Oxide Magnetic Nanostructures" (promotor J.Korecki)
7. M.Oćwieja "Kinetyka tworzenia oraz struktura monowarstw nanocząstek srebra na powierzchniach heterogenicznych" (promotor Z.Adamczyk)

8. A. Węgrzynowicz "Otrzymywanie nieorganicznych membran na bazie zeolitów i ich zastosowanie w procesach rozdziału mieszanin" (promotor M. Derewiński)
9. A. Wójcik "Selected Iron-Dependent Dioxygenases as Examples of Biological Nanostructures: Computer Modeling of Catalytic Activity" (promotor T. Borowski)

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

1. 45. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 13-15 marca 2013 (B. Sulikowski)
2. International SPR Workshop "New Dimensions in Life Sciences", Kraków, April 12th, 2013 (B. Jachimska)
3. HEREDITAS Centre Workshop "Identification, Conservation and Protection of Art Works Made of Polymeric Materials" ARTPLAST, Kraków, December 4th-5th, 2013 (M. Łukomski)

IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. Festiwal Nauki "Oblicza wody", Rynek Główny, Kraków 15-18 maja 2013 (M. Derewiński)
2. 17. Piknik Naukowy, Stadion Narodowy, Warszawa, 15 czerwca 2014 (M. Strojecki)
3. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 7 listopada 2013 (M. Nattich-Rak)

REPORT of the INTERNATIONAL ADVISORY BOARD (IAB)

Research Activities of 2012-2013

*Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry,
Polish Academy of Sciences*

Introduction

The Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences (hereinafter 'Institute') addresses a multidisciplinary area at the interface between chemistry, physics, biology, engineering and material sciences which is of critical importance for the development of a sustainable society, thus making a key contribution to:

- i) sustainable use of energy and mobility;
- ii) efficiency in using resources;
- iii) manufacture and production;
- iv) development of innovative materials;
- v) quality of life and health;
- vi) environmental protection;
- vii) cultural heritage preservation

Addressing these important and challenging areas for the future of society it is necessary to have a critical mass of well-integrated competences, which can combine the fundamental knowledge to an applied vision able to catalyze the transfer to companies and innovation. For this reason, it is necessary to maintain a good balance between fundamental investigations and development. We appreciate the effort of the Institute to maintain this balance as well as the effort made in applying the fundamental knowledge developed in the Institute to contiguous areas, from biology and soft matter to cultural heritage, where there is a common platform of fundamental knowledge in both dry and wet surface and interface science, material and colloid science, and catalysis.

Impact of IAB previous report recommendations

We recognize the successful reorganization of the internal scientific structure of the Institute in response to the recommendations of the previous report of IAB, in particular regarding:

- the effort to aggregate the research topics into larger common projects, which is a necessary action to highlight the identity and visibility of the Institute;
- the new structure of research groups introduced in 2012, with a significant reduction in their number with an increase in their critical mass and research potential;
- the opening of new three research groups to address new important topics;
- the process of continuous adapting the Institute's structure to address emerging needs and frontiers of research.

IAB greatly appreciate the effort in promoting young researchers leadership, with four research groups led by researchers below age of 45.

We expect that this reorganization will lead in excellence and flexibility in research, and hence enhance high-quality publications and capacity to raise funds.

We recognize the relevant improvement made in the last two years in terms of number and quality of publications in high-impact journals.

We commend the Institute for expanding scientific capabilities: for example for the successful participation in the SOLARIS project (Krakow synchrotron), the engaging in various projects of the national programme PIOG "Innovative Economy", and achieving the status of leading national research centre KNOW in physical sciences.

IAB appreciates the high quality of presentations, with clear evidence of the increasing collaborations internal, national and international. Improved presentation and language skills of young scientists were notable.

Research, education and promotion of science

The Institute has further strengthened in the last two years its leading position in research, educations and promotion of science. In particular:

- high ranking in the PAS evaluation of the Institutes in the area of chemistry
- large and increasing number of high impact papers;
- increasing EC structural funds (Human capital - doctoral studies);
- intensified collaboration with several research centres and organization of joint laboratories;
- participation in several consortia, research clusters and international networks including coordination of COST Action CM1101;
- active participation in several educational activities, from doctoral programmes to postgraduate schools and collaboration with high schools;
- significant activities in promotion of science, with open-door days, and participation in Science Festivals.

Transfer of research to application

IAB appreciates the effort made in transferring the results of fundamental research to applications, such as the projects in the frame of EU structural funds programme and the application of modeling on cultural heritage preservation to energy saving of museums. A further promotion of the research innovation capacities of the Institute is encouraged by the IAB.

Funding aspects

The statutory subsidy from the Polish Ministry of Science and Higher Education and the external funding (non-statutory) has increased in the last two years. The largest part of these funds is for fundamental research, which is consistent with the purpose of the Institute. IAB feels that to further expand the capacities of the Institute it is necessary to secure funds from EU and international programmes, such as ERC and Marie Skłodowska - Curie grants, and research projects supported by companies.

Scientific productivity

IAB is satisfied with the improvement of the scientific productivity, both in respect to quality and quantity. Productivity is significantly above the criteria established by the Ministry.

Personnel policy

Reorganization has increased the opportunities offered to young researchers for leadership and promotion. IAB appreciates the policy of annual evaluation of the personnel, but the evaluation criteria should be refined to include aspects such as related to the opening of new research areas and long-term projects which are essential for the future development of the Institute.

Effort should be dedicated to attract foreign PhD students and post-docs, through the participation in international activities (Marie Skłodowska - Curie, Erasmus Mundus, etc.) to overcome limitations in funds available.

IAB also encourages young researchers to spend part of their training outside Poland. The senior staff should spend periods (both long and short) carrying out research in foreign Institutes. The Institute should actively promote this policy to maintain scientific health and motivation of students and staff.

Opportunities

The increased participation in consortia, such as the Marian Smoluchowski Krakow Research Consortium "Matter-Energy-Future", the national consortium "Polish Synchrotron", SPINLAB lab., etc., extend the opportunities for new topics and collaborations in the area of surface and material science, and catalysis.

Cultural Heritage provides an area particularly rich in opportunities for high profile international impact.

Recommendations

Research strategy

A long-term strategy, based on the vision of frontiers of research in the area addressed by the Institute, and the possibility to exploit the fundamental knowledge to promote innovation, should be developed and formalized. The strategy should be developed by the Director with the Group Leaders.

Assessment

IAB recognizes the critical importance of raising funds and publishing high-quality work. Assessment should also include other factors such as the investment in the future, opening new research areas, and application of the research generated in the Institute.

Scientific quality

IAB appreciates the effort made in improving quality of research. Some areas are clearly world-class, but other areas still need to increase quality. The scientific leadership should take responsibility to achieve this aim.

Funds

The Institute should intensify the effort to secure ERC, EU and other international funds and research contracts with companies.

International mobility

IAB recommends that a policy to encourage international mobility for young and senior staff be established. The expectation of time abroad will increase the attractiveness of the Institute as a place to study for a PhD. Research periods in foreign labs will enhance the creativity, diversity and reputation of the scientists and hence improve the international recognition of the Institute.

Kraków, February 18th, 2014

Ewa Bulska
Hans-Joachim Freund
Valentin N. Parmon

Gabriele Centi
Andrew Howe
Dimo Platikanov

Uchwała 161

Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk

wg protokołu z XII posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk (kadencji 2011-2014) w dniu 27 marca 2014 roku dotycząca: sprawozdania z działalności naukowej Instytutu w roku 2013

Sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu w 2013 r.

Przewodnicząca Rady oddała głos Z-cy Dyrektora ds. Naukowych prof. Romanowi Kozłowskiemu, który przedstawił sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu w 2013 r z rozróżnieniem działalności badawczej, organizacyjnej i edukacyjnej.

W ramach działalności statutowej realizujemy 14 zadań badawczych.

Struktura środków pozyskiwanych z zewnątrz:

Sukcesy odnieśliśmy głównie w pozyskiwaniu licznych grantów NCN dla młodych badaczy (w nawiasach podano liczbę projektów realizowanych w ubiegłym roku):

- 7 (5) projektów SONATA unikatowy warsztat naukowy dla młodych badaczy ze stopniem doktora
- 13(7) projektów OPUS
- 6 (3) projekty PRELUDIUM dla młodych badaczy rozpoczynających karierę naukową nieposiadających stopnia doktora
- 1 projekt HARMONIA

Mamy też granty Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej:

- 1 projekt POMOST – grant dla rodziców ułatwiający powrót do pracy naukowej

Kontynuujemy duży blok grantów MNiSW:

- 10 (15) projektów badawczych własnych
- 1 (2) projektów promotorskich
- 4 (2) projektów IUVENTUS PLUS
- 1 projekt MOBILNOŚĆ PLUS

Ważnym źródłem finansowania są Fundusze strukturalne Unii Europejskiej:

- 4 projekty Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka
- 2 projekty Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Projekty NCBiR:

- 2 projekty strategiczne
- 1 projekt w programie badań stosowanych
- 1 projekt LIDER (dla młodych doktorów 2012-2015)

Jeśli chodzi o projekty międzynarodowe, to posiadamy:

- 4 projekty: 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej
- 2 projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej (1 grant podstawowy, 1 mały)
- 2 projekty na podstawie umów dwustronnych

Koordinujemy akcję COST CM1101 “Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials” 2012-2016 (prof. dr hab. Piotr Warszyński).

Prof. R. Kozłowski przypomniał, że dużym osiągnięciem Instytutu było uzyskanie w zeszłym roku Statusu Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego KNOW w zakresie nauk fizycznych na okres 5 lat (2012-2017). Otrzymaliśmy ten status jako członek Krakowskiego Konsorcjum Naukowego im. Mariana Smoluchowskiego w skład którego wchodzi: Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Wydział Chemii UJ, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ oraz Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN.

Podsumowując prof. R. Kozłowski przedstawił tabelę udziału środków z poszczególnych grup projektów. Środki stałe, jakimi dysponujemy, pochodzące z działalności statutowej, stanowią kwotę ok. 7 mln zł. Pewnego rodzaju dotacją statutową są środki, jakie dostajemy z tytułu posiadania statusu KNOW (997 tys. zł). Środki statutowe stanowią ok 37% środków ogólnych, natomiast pozyskane przez nas środki zewnętrzne stanowią ok. 12.5 mln, w tym ok. 11 mln to środki krajowe, w których dominują granty NCN i Fundusze Strukturalne.

Dodatkowy budżet z tytułu posiadania statusu KNOW został rozdysponowany następująco:

- 50% - zwiększenie funduszu wynagrodzeń
- 50% - wsparcie badań:
 - 6 stypendiów im. M. Smoluchowskiego
 - zatrudnianie osób po doktoracie
 - wsparcie współpracy z partnerami konsorcjum
 - wsparcie konferencji, zapraszanie naukowców z zagranicy, popularyzacja badań

Projekty badawcze Instytutu wspierające współpracę z partnerami (po 20.000 zł):

- Wydział Chemii UJ – 6
- Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH – 2
- Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ – 1
- Instytutu Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego PAN – 1

Projekty w ramach Akcji FOKUS „Identyfikacja, konserwacja i ochrona dzieł sztuki wykonanych z materiałów polimerowych”, z Wydziałem Chemii UJ:

- warsztaty ARTPLAST, grudzień 2013
- wniosek o grant w NCBiR „Ochrona obiektów z tworzyw polimerowych w warunkach przechowywania i ekspozycji muzealnej”, konsorcjum 9 partnerów, styczeń 2014.

Dorobek naukowy, który wyniknął z realizacji wszystkich projektów badawczych w 2013 r. to:

- Przeglądy i rozdziały w monografiach - 12
- Artykuły w czasopismach międzynarodowych (Thomson Reuters JCR) –115
- Artykuły w innych czasopismach i książkach – 10
- Artykuły w recenzowanych materiałach konferencyjnych – 18
- Streszczenia w materiałach konferencyjnych – 244
- Publikacje Instytutu (zbiory abstraktów) – 1
- Praca habilitacyjna dr hab. Barbary Jachimskiej

Uzyskaliśmy również dwa patenty:

1. Sposób wytwarzania katalizatora wanadowo-wolframowego do destrukcji związków organicznych zawierających chlor, a zwłaszcza dioksyn i furanów, T. Machej, G. Wielgosiński, A. Grochowalski, T. Pająk, W. Cwiakalski, R. W. Łoziński, E. Serwicka-Bahranowska
2. Sposób epoksydacji propylenu, J. Połtowicz, K. Pamin, E. Serwicka-Bahranowska

Prof. R. Kozłowski omówił strukturę zatrudnienia (w nawiasach, dla porównania, stan na koniec roku 2012), wskazując, że na całkowitą liczbę 133(121) pracowników, 53(50) to pracownicy naukowcy, w tym 19(19) samodzielnych pracowników naukowych, 41(33) pracowników badawczo-technicznych. Łącznie 113 osób zatrudnionych jest bezpośrednio w badaniach. Liczba młodych doktorów (poniżej 35 lat) wynosi 22(16).

Prof. R. Kozłowski przedstawił też punktację MNiSW w odniesieniu do opublikowanych przez pracowników Instytutu publikacji (z listy Thomsona Reutersa JCR) oraz liczbę publikacji odpowiadającą maksymalnej punktacji. Posiadamy 80 publikacji powyżej 30 punktów.

Prof. R. Kozłowski przedstawił także wykaz 3 najlepszych publikacji za rok 2013:

1. D. H. Knack, J. L. Marshall, G. P. Harlow, A. Dudzik, M. Szaleniec, S-Y. Liu, J. Heider, "BN/CC isosteric compounds as new class of enzyme inhibitors: N- and B-ethyl-1,2-azaborine inhibit ethylbenzene hydroxylation as non-convertible substrate analogs", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 52 (2013) 2599–2601 (MNiSW 45, IF=13,734)
2. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski, "On the catalytic mechanism of (S)-2-hydroxypropylphosphonic acid epoxidase (HppE). A Hybrid DFT Study", *Chemistry - A European Journal*, 19 (2013) 771-781 (MNiSW 40, IF=5,831)
3. D. Wilk, Ł. Bratasz, R. Kozłowski, "Shrinkage cracking in Roman cement pastes and mortars", *Cement Concrete Research*, 53 (2013), 168-175 (MNiSW 45, IF=3,112)

Najlepszy artykuł przeglądowy:

M. Lundberg, T. Borowski, "Oxoferryl species in mononuclear non-heme iron enzymes: Biosynthesis, properties and reactivity from a theoretical perspective", *Coordination Chemistry Reviews*, 257 (2013) 277-289 (MNiSW 50, IF=11,016)

Najlepszy artykuł popularno-naukowy:

J. Szaleniec, M. Szaleniec, "Czekoladowa chemia", *Charaktery - magazyn psychologiczny*, 04 (2013) 94-97

W dalszej części prof. R. Kozłowski przedstawił trzy największe osiągnięcia naukowe Instytutu za ubiegły rok, pierwsze dwa zostały zaprezentowane na posiedzeniu Rady.

1. Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych, lotnych związków organicznych - projekt POIG „VOX”
Ewa Serwicka-Bahranowska, Tadeusz Machej, Łukasz Mokrzycki, Roman Dula, Alicja Michalik-Zym, Daria Napruszewska, Małgorzata Zimowska
2. Monowarstwy fibrynogenu na powierzchniach stałych - określenie konformacji, stabilności oddziaływań z ligandami koloidalnymi
Zbigniew Adamczyk, Monika Wasilewska, Anna Bratek-Skicki, Małgorzata Nattich-Rak, Paulina Żeliszewska
3. Polielektrolitowe nanokapsułki jako nośniki leków
Krzysztof Szczepanowicz, Marek Piotrowski, Karolina Podgórna, Tomasz Kruk, Piotr Warszyński

Kolejnym punktem było omówienie statystyki dotyczącej Studiów doktoranckich.

- Międzynarodowe Studia Doktoranckie (z Wydziałem Chemii Politechniki Rzeszowskiej) – 23 (35)
- Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie „Nauki Molekularne dla Medycyny” (z Instytutem Farmakologii PAN i Wydziałami Chemii i Lekarskim UJ) – 6 (39)
- Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie „Zaawansowane materiały dla nowoczesnych technologii i energetyki przyszłości” (z IFJ PAN oraz Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH) – 15 (49)

Łącznie mamy 44 doktorantów.

Zdobyte tytuły naukowe w Instytucie w 2013 r. to:

1 tytuł naukowy profesora - prof. dr hab. Alicja Drelinkiewicz

4 zakończone habilitacje:

- dr hab. Maciej Szaleniec
- dr hab. Nika Spiridis
- dr hab. Jakub Barbasz
- dr hab. Łukasz Bratasz

9 stopni naukowych doktora

Na zakończenie prof. R. Kozłowski omówił aktywność pracowników IKiFP PAN w organizacji i współorganizacji konferencji naukowych: 45. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, International SPR Workshop “New Dimensions in Life Sciences”, a także organizacji działań promujących Instytut, jak organizacja Dnia Otwartego Instytutu, czy udział w Festiwalu Nauki, udział w 18. Pikniku Naukowym, na Stadionie Narodowym w Warszawie i w warsztatach ARTPLAST „Identification, Conservation and Protection of Art Works Made of Polimeric Materials”.

Przewodnicząca Rady Naukowej prof. dr hab. M. Nowakowska podziękowała prof. R. Kozłowskiemu i poprosiła o pytania i komentarze. W dyskusji udział wzięli: mgr W. Lubiewa – Wieleżyński, prof. E. Broclawik, prof. E. Serwicka, prof. M. Witko.

Przewodnicząca Rady wyraziła w imieniu zebranych opinię, że osiągnięcia Instytutu są znaczące i ich wzrost jest spektakularny. Pani Przewodnicząca podkreśliła aktywność pracowników w zdobywaniu środków finansowych i zaproponowała Radzie przyjęcie sprawozdania. Rada Naukowa jednogłośnie przyjęła sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu za rok 2013.

za zgodność z protokołem
dr hab. Tomasz Borowski, prof. IKiFP
sekretarz Rady Naukowej IKiFP PAN