



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



**SPRAWOZDANIE  
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU  
W ROKU 2014**



**Kraków, luty 2015**

## **SPIS TREŚCI**

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	<b>5</b>
Zadania badawcze realizowane w roku 2014	<b>9</b>
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2014	<b>15</b>
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2014	<b>21</b>
Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący	<b>21</b>
Działalność statutowa Instytutu	<b>25</b>
Projekty badawcze MNiSW	<b>55</b>
Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"	<b>63</b>
Projekty badawcze NCN "Sonata"	<b>67</b>
Projekty badawcze NCN "Opus"	<b>75</b>
Projekty badawcze NCN "Preludium"	<b>93</b>
Projekty badawcze NCN "Harmonia"	<b>103</b>
Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"	<b>107</b>
Projekty FNP "Pomost"	<b>113</b>
Projekty strategiczne NCBiR	<b>117</b>
Projekty badań stosowanych NCBiR	<b>121</b>
Projekty NCBiR "Lider"	<b>125</b>
Projekty 7. Programu Ramowego UE	<b>129</b>
Projekty Akcji COST UE	<b>133</b>
Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej	<b>139</b>
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	<b>145</b>
Inne międzynarodowe projekty badawcze	<b>151</b>
Inne zadania	<b>155</b>
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2014	<b>159</b>
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	<b>159</b>
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	<b>197</b>
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	<b>231</b>



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

## **Teoria i eksperyment w badaniach podstawowych i aplikacyjnych**

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk jest jedyną instytucją naukową w Polsce specjalizującą się w badaniach z obszarów katalizy i fizykochemii powierzchni. W Instytucie prowadzi się interdyscyplinarne badania łączące warsztaty badawcze chemii, fizyki, technologii chemicznej, inżynierii materiałowej, a także biologii i medycyny. W centrum zainteresowań naukowych kadry Instytutu leżą zjawiska zachodzące na granicach fazowych gaz–ciało stałe, gaz–ciecz i ciecz–ciało stałe. Prowadzone w Instytucie teoretyczne i doświadczalne badania podstawowe łączą się z badaniami o charakterze stosowanym, których wyniki mają zastosowanie w procesach technologicznych.

Kadra Instytutu to ponad 120 pracowników, z których 90 jest bezpośrednio zaangażowanych w prowadzenie prac badawczych. Ponadto, w badaniach uczestniczy 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

Badania nad materiałami i procesami katalitycznymi koncentrują się na rozwijaniu nowych, „inteligentnych” materiałów o dobrze zdefiniowanej strukturze i właściwościach dostosowanych do konkretnych reakcji katalitycznych. Procesy katalityczne będące przedmiotem badań wpisują się w nurt „zielonej chemii” i są optymalizowane pod kątem obniżenia energochłonności i eliminacji lub ograniczenia ilości niepożądanych produktów ubocznych. Inny rozwijany kierunek badań dotyczy katalitycznego działania enzymów i ich syntetycznych mimetyków. Synergiczne użycie metod teoretycznych i eksperymentalnych pozwala opisać mechanizmy katalitycznego działania badanych układów na poziomie molekularnym i opracowywać użyteczne katalizatory.

W badaniach teoretycznych stosuje się metody chemii kwantowej jako narzędzie określania i charakteryzowania czynników elektronowych i strukturalnych mających wpływ na ukierunkowanie i selektywność procesów chemicznych leżących u podstaw badanych procesów katalitycznych. Wykorzystywane jest także modelowanie z wykorzystaniem metod fizyki ciała stałego, jak również metody mechaniki i dynamiki molekularnej oraz techniki symulacji Monte Carlo.

Jednym z głównych celów prac badawczych prowadzonych w Instytucie 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. Drugi ważny i prężnie rozwijany dział badań z tego obszaru dotyczy procesów mikroenkapsulacji i zwiększania biokompatybilności materiałów, które mogą znaleźć zastosowania w nowoczesnych metodach diagnostycznych i terapeutycznych

Rezultatami prowadzonych badań są osiągnięcia aplikacyjne obejmujące opracowanie nowych katalizatorów do produkcji bio-paliw, wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych oraz udoskonalanie metod służących ochronie zabytków. W zakresie badań podstawowych głównymi osiągnięciami Instytutu w roku 2014 jest opis mechanizmu powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości oraz wykorzystanie

nowych metod spektro-mikroskopowych w badaniach nanostruktur powierzchniowych. Instytut posiada bardzo dobre, a w niektórych przypadkach unikatowe w skali krajowej, zaplecze aparaturowe. W badaniach wykorzystuje się także aparaturę wspólnych laboratoriów międzyinstytutowych.

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

## **Współpraca krajowa i międzynarodowa**

Instytut szczyli się wieloletnią tradycją w organizowaniu i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni w Polsce. Od ponad czterdziestu lat organizuje coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne, które cieszą się wielką popularnością w środowisku naukowym.

Dla rozwoju współpracy oraz możliwości prowadzenia badań interdyscyplinarnych 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.

Rozwojowi badań interdyscyplinarny przysługuje się również uczestnictwo Instytutu 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.

Od lipca 2012, Instytut posiada 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 informacji o badaniach naukowych wśród społeczeństwa ma wielkie znaczenie w budowaniu społecznej aprobaty dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki. 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.



## ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2014

### Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący (MNiSW)

1. Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. M. Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" [2012-2017] 23

### DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

#### Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych 29
2. Nowe źródła energii; materiały i procesy. Procesy katalityczne z udziałem bio-surowców. Rola brązów  $H_xMoO_3$  i  $H_yWO_3$  w selektywności uwodorniania  $C=O/C=C$  w aldehydach nienasyconych na katalizatorach 30
3. Badania nad przeróbką alkoholu furfurylowego w kierunku bio-komponentów do paliw i tworzyw sztucznych 31
4. Nowe perokso - związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania 32
5. Procesy fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza – analiza produktów degradacji. Substancje humusowe - trudny substrat dla procesów fotokatalitycznego oczyszczania wody 33
6. Materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe i modelowanie kwantowo-chemiczne. Modyfikacja stanów spinowych i aktywności katalitycznej centrów kobaltowych w zeolitach przez koadsorpcję amoniaku 34
7. Nowe materiały katodowe dla wysokotemperaturowych ogniwo paliwowych. Nowy kompozytowy materiał na katodę w wysokotemperaturowych ogniwach paliwowych na osnowie kobaltanu samaru i strontu 35

#### Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria

8. Badania teoretyczne aktywności katalitycznej katalizatorów tlenkowych ze szczególnym uwzględnieniem heteropolizwiązków 39
9. Właściwości strukturalne, elektronowe i dynamika powierzchni i nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni 40
10. Konwersja alkoholi na katalizatorach kwaśnych, jako metoda określania właściwości kwasowych 42
11. Mechanizmy reakcji enzymatycznych i biomimetycznych - badania teoretyczne. Rola katalitycznie nieaktywnej domeny N-końcowej w funkcjonowaniu dioksygenazy katecholowej 43

#### Nanostruktury materii miękkiej

12. Topologia i właściwości elektrokinetyczne monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe. Określenie konformacji fibrynogenu na podstawie pomiarów adsorpcji mikrocząstek koloidalnych 47
13. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe 48
14. Wpływ rozmiarów powstającego filmu ciekłego i ładunku elektrycznego na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości 49
15. Modelowanie molekularne oraz przewidywanie właściwości wybranych układów o potencjalnym znaczeniu biomedycznym 50



## Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

16. Opracowanie modelu osadzania pyłów we wnętrzach budynków zabytkowych 53

## KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

### Projekty badawcze MNiSW

1. N N204 205240 [2011-2014] Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego 57
2. N N204 133640 [2011-2014] Wpływ mikro- i nano-pęcherzyków na powierzchniach hydrofobowych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych 58
3. N N204 439640 [2011-2014] Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji transmetylacji porforyny i jej wybranych pochodnych 59
4. N N204 439040 [2011-2014] Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności 60
5. N N209 757340 [2011-2014] Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek 61

### Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"

1. ST4 [2013-2017] Wspomagane komputerowo projektowanie i przewidywanie właściwości nośników leków opartych na strukturze nanorurek węglowych 65

### Projekty badawcze NCN "Sonata"

1. HS2 [2011-2014] Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów 69
2. ST5 [2011-2014] Nowe katalizatory Pd-Pt/nanokompozyt hybrydowy do redukcji tlenu w polimerowym ogniwie paliwowym
3. ST5 [2011-2014] Funkcjonalizacja filmów polimerowych jako narzędzie do otrzymywania nowoczesnych nanomateriałów o znacznym potencjale aplikacyjnym 70
4. ST4 [2012-2015] Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: modelowanie komputerowe 71
5. ST5 [2012-2017] Wcelowane dostarczanie laków - synteza i funkcjonalizacja nano-nośników 72
6. ST4 [2013-2017] Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium denitrificans* 73
7. ST4 [2013-2017] Mechanizm i kinetyka koalescencji pęcherzyków powietrza na spokojnych i zaburzanych z kontrolowaną częstotliwością powierzchniach ciecz/gaz 74

### Projekty badawcze NCN "Opus"

1. HS2 [2011-2014] Mechanizm zniszczeń obrazów panelowych z uwzględnieniem struktury przyrostów rocznych drewna i rzeczywistych fluktuacji klimatu 77
2. ST8 [2011-2014] Opracowanie technologii wytwarzania stabilnej i łatwo biodegradowalnej piany ciekłej do zastosowań przemysłowych i biomedycznych 78
3. ST5 [2012-2015] Wpływ gliceryny jako nietoksycznego i biodegradowalnego rozpuszczalnika na mechanizm utleniania fenolu 79
4. ST4 [2012-2014] Monomery tlenków chromu(V), molibdenu (VI) i wolframu (VI) na powierzchni amorficznej krzemionki modyfikowanej glinem. Symulacje periodyczna metodą DFT 80

5. ST4 [2012-2015] Właściwości fizykochemiczne i katalityczne heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment	81
6. ST4 [2012-2016] Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant-polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanonosników	82
7. NZ1 [2012-2015] Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne i obliczeniowe	83
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 <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub>	84
9. ST5 [2013-2016] Nanoklastery zeolitów jako podstawa nowych warstwowych materiałów porowatych do procesów katalitycznych w fazie ciekłej	85
10. ST5 [2013-2016] Projektowanie, synteza i charakterystyka fizykochemiczna katalizatorów rutenowych oraz ich zastosowanie w reakcji uwodornienia prochiralnych ketonów	86
11. ST4 [2013-2016] Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór	87
12. ST4 [2013-2016] Określenie mechanizmów adsorpcji wybranych białek anizotropowych w kontrolowanych warunkach transportu	88
13. ST5 [2013-2016] Struktura i właściwości warstw białkowych: od biomolekuły do funkcjonalnej warstwy ( badania eksperymentalne i symulacje)	89
14. ST5 [2014-2016] Synteza kompozytów zawierających nanocząstki metali (Fe, Mn, Pd) i porowate, domieszkowane azotem materiały węglowe o różnej morfologii ziaren oraz charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych w reakcji redukcji tlenu	90
15. ST5 [2014-2017] Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania na osnowie organosmektytów interkalowanych odwróconymi micelami zawierającymi nanostruktury typu wodorotlenków i hydrotalkitów	91

### **Projekty badawcze NCN "Preludium"**

1. ST5 [2012-2014] Synteza biozgodnych nanośników dla wybranych substancji neuroprotekcyjnych	95
2. ST4 [2013-2015] Udoskonalenie metody detekcji nadtlenu wodoru po przez modyfikację nanocząstek błękitu pruskiego polimerami przewodzącymi oraz zredukowanym tlenkiem grafenu	96
3. ST5 [2013-2016] Wielowarstwowe filmy polimerowe zawierające nanocząstki oraz grafen jako funkcjonalne powłoki i membrany	97
4. ST5 [2013-2015] Charakterystyka elektrokinetyczna oddziaływań monowarstw HSA rekombinowanego z ligandami jonowymi	98
5. ST4 [2013-2015] Określenie mechanizmów adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach nośników koloidalnych	99
6. ST4 [2014-2016] Sprzężenie elektronowe cząsteczki tlenu azotu (II) z centrami kobaltowymi w różnych otoczeniach koordynacyjnych: rola przepływu gęstości elektronowej w aktywacji liganda	100
7. ST4 [2014-2016] Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych	101

### **Projekty badawcze NCN "Harmonia"**

1. ST4 [2013-2015] Obrazowanie lokalnej kinetyki reakcji katalitycznych dla układów modelowych w skali mezo- i nanoskopowej	105
---	-----

### **Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"**

1. [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 **109**
2. [2013-2015] Zaawansowane badania teoretyczne nad reakcją mutarotacji D-glukopiranozy **110**
3. [2013-2015] Magnetyczne systemy dostarczania leków z możliwością sterowanego uwalniania czynnika aktywnego **111**

### **Projekty FNP "Pomost"**

1. [2011-2014] Selektywna hydrogenoliza gliceryny do glikoli *via* acetyl na katalizatorach heterogenicznych zawierających metale i tlenki metali **115**

### **Projekty strategiczne NCBiR**

1. [2012-2015] NUCLEAR Projektowanie katalizatorów do rekombinacji wodoru i tlenu pod kątem kontroli ich aktywności jako czynnika o krytycznym znaczeniu dla bezpieczeństwa pracy rekombinatorów w instalacjach nuklearnych **119**

### **Projekty badań stosowanych NCBiR**

1. [2013-2016] HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych (MN) **123**

### **Projekty NCBiR "Lider"**

1. [2012-2015] Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej **127**

## **ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE**

### **Projekty 7. Programu Ramowego UE**

1. EC 7<sup>th</sup> FP [2012-2015] NanoEIS Nanotechnology Education for Industry and Society (CSA) **131**
2. EC 7<sup>th</sup> FP HYPERCONNECT [2013-2015] Functional Joining of Dissimilar Materials Using Directed Self-assembly of Nanoparticles by Capillary-bridging (CP) **132**

### **Projekty Akcji COST UE**

1. EC COST CM1101 [2011-2015] Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials **135**
2. EC COST CM 1305 [2012-2016] ECOSTBio Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry **136**
3. EC COST CM1203 [2012-2016] PoCheMoN Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience **137**
4. EC COST MP1106 [2012-2016] SGI Smart and Green Interfaces - from Single Bubbles and Drops to Industrial, Environmental and Biomedical Applications **138**

### **Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej**

1. [2013-2016] NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies against Neurodegenerative Diseases (core) **141**
2. [2013-2015] FUNCLAY Synthesis and Functionality of Innovative Porous Clay Hybrid Nanostructures (small grant) **141**

3. [2013-2016] InlinePV In-line Processing of n+/p and p/p+ Junction System for Cheap Photovoltaic Module Production (core) **143**

### **Projekty Funduszy Strukturalnych UE**

1. PO KL 4.1.1 [2009-2015] ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości **147**
2. PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym **148**
3. PO IG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO Funkcjonalne nano- i mikrocząsteczki – synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach **149**
4. PO KL 4.1.1 [2010-2015] ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny **150**

### **Inne międzynarodowe projekty badawcze**

1. [2013-2015] Organo-Clays as Intermediates for the Synthesis of Functional Hybrid Materials (projekt współpracy PAN - AN Słowacji) **153**

### **INNE ZADANIA**

1. Węglowe ogniwa paliwowe z elektrolitem ze stopionych węglanów (DC-MCFC). Odsiarczanie gazów wytworzonych w reaktorze Boudouarda do zasilania ogniw paliwowych ze stałym elektrolitem tlenkowym **157**
2. SCIEEX Advanced computer simulations of hyaluronan conformational properties **158**



## **SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘC INSTYTUTU W ROKU 2014**

### **W ROKU 2014:**

realizowano:	16 statutowych zadań badawczych 43 projekty badawcze (granty) MNiSW, NCBiR, NCN, FNP (w tym 7 promotorskich) 2 projekty 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej 4 projekty UE COST Action 3 projekty Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej 1 inny projekt międzynarodowy 4 projekty Funduszy Strukturalnych UE
opublikowano:	7 rozdziałów w monografiach 105 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy Journal Citation Reports (lista A) (oraz 14 ogłoszonych elektronicznie) 5 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy MNiSW (lista B) 13 publikacji w innych w czasopismach, recenzowanych materiałach konferencyjnych oraz w pismach popularno-naukowych 261 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	3 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wyłożono i zaprezentowano:	104 referaty i komunikaty (w tym 22 referaty plenarne i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 229 posterów
dokonano:	2 zgłoszeń patentowych (1 za granicą)
we współpracy z zagranicą:	opublikowano 38 wspólnych prac w czasopismach naukowych ogłoszono 31 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 158 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę
zorganizowano:	5 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki
tytuł profesora:	uzyskały 2 osoby (1 z zagranicy)
stopień doktora habilitowanego:	uzyskały 2 osoby (1 na UJ)
stopień doktora:	uzyskało 8 osób (1 na UJ)



## **WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2014**

### **Opracowanie nowych katalizatorów do produkcji bio-paliw**

*(Alicja Drelinkiewicz, Żaneta Kalemba-Jaje, Erwin Lalik, Elżbieta Bielańska, Robert Kosydar, Elena N. Konyushenko, Jaroslav Stejskal)*

[współpraca z Institute of Macromolecular Chemistry AS CR]

Osiągnięciem jest opracowanie nowych stałych katalizatorów polimerowych na podstawie sprotonowanej polianiliny dla wytwarzania bio-paliw (bio-estrów, Biodiesel) w dwu procesach: transesteryfikacji triglicerydów oraz estryfikacji kwasów tłuszczowych metanolem. Dzięki zwiększeniu hydrofobowości w otoczeniu centrów aktywnych, którą osiągnięto przez dobór kwasu sulfonowego protonującego polianilinę, uzyskano katalizator o stabilnej i wysokiej aktywności w obu reakcjach. Tak otrzymane katalizatory po osadzeniu na krzemionce wykazywały aktywność porównywalną do katalizatorów komercyjnych (Nafion SAC-13).

### **Nowe metody spektro-mikroskopowe w badaniach nanostruktur powierzchniowych**

*(Józef Korecki, Nika Spiridis, Dorota Wilgocka-Ślęzak, Kinga Freindl, Ewa Madej, Robert Socha, Tomasz Giela)*

[współpraca z Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH]

Osiągnięciem jest możliwość obrazowania i śledzenia w czasie rzeczywistym szerokiej klasy zjawisk powierzchniowych obejmujących: wzrost ultracienkich warstw, powstawanie nanostruktur, przejścia fazowe, desorpcję, adsorpcję, oraz dyfuzję. Używając mikroskopu fotoemisyjnego (PEEM) oraz mikroskopu na elektronach niskoenergetycznych (LEEM) uzyskano informacje ze zdolnością rozdzielczą rzędu nanometrów oraz czułością strukturalną, chemiczną i magnetyczną zarówno w warunkach laboratoryjnych, jak i z użyciem promieniowania synchrotronowego.

### **Mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości**

*(Jan Zawala, Dominik Kosior, Anna Niecikowska, Kazimierz Małysa)*

Osiągnięcie polega na wykazaniu, że powstawanie kontaktu trójfazowego (TPC) na powierzchniach ciał stałych o niskiej i wysokiej hydrofobowości przebiega według różnych mechanizmów. Na powierzchniach o niskiej hydrofobowości oddziaływania elektrostatyczne decydują o możliwości przerwania filmu i mają istotny wpływ na kinetykę powstawania TPC. Natomiast na powierzchniach o wysokiej hydrofobowości oddziaływania elektrostatyczne nie są istotne, a czynnikiem determinującym kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego jest obecność powietrza (nano- i mikro pęcherzyki) na tych powierzchniach.



## **INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2014:**

W roku 2014 zorganizowano 5 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu, stoiska na Krakowskim Festiwalu Nauki (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

### **Działalność popularyzatorska**

#### **Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 7 listopada 2014**

Motywacją dla zorganizowania w dniu 7 listopada 2014, corocznego, już dziewiątego z kolei Dnia Otwartego Instytutu było przekonanie, że publiczne finansowanie badań naukowych zobowiązuje do upowszechniania wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych.

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

- J.Barbasz "Nauka i sport"
- D.Rutkowska-Żbik "Czy wiesz, co żujesz? Chemia gumy do żucia"
- M.Strojecki "Co słyhać w muzeum, czyli emisja akustyczna historycznych mebli i rzeźb z drewna"
- B.Sulikowski "Fascynujące struktury trójwymiarowe - zeolity"
- J.Szaleniec. M.Szaleniec "Zobaczyć niewidzialne, Chemia i fizyka w medycznej diagnostyce obrazowej"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Mikro i nano świat widziany w mikroskopie skaningowym
- Temperatura, ciśnienie i my
- Owocowe baterie
- Reakcja autokatalityczna
- Enzymy wokół nas
- W kolorowym świecie barwników
- Niebezpieczna chemia
- Krystalizacja a odkrycia Marii Skłodowskiej-Curie
- Konwertery Energii
- Chemia od kuchni
- Kolorowy świat mieszanin
- Spektakularne eksperymenty chemiczne

### **Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych** (załączono odpowiednie materiały)

- 46. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków, 19-21 marca 2014
- 3<sup>rd</sup> International Symposium on Air & Water Pollution Abatement Catalysis, Krakow, September 1<sup>st</sup>-5<sup>th</sup>, 2014
- Seminarium Sprawozdawcze POIG FUNANO, Kraków, 21 października 2014
- 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow, May 14<sup>th</sup>-17<sup>th</sup>, 2014 (z Uniwersytetem Jagiellońskim)
- International Symposium on Clean Energy from Ethanol, Rzeszów, July 28<sup>th</sup>-31<sup>st</sup>, 2014 (z Uniwersytetem Rzeszowskim)

**Organizacja imprez popularno-naukowych** (załączono odpowiednie materiały)

- Festiwal Nauki "Z nauką przez wieki", Rynek Główny, Kraków 21-24 maja 2014 (N.Spiridis)
- Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 7 listopada 2014 (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. Konsorcjum 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 roku 2014, Instytut podjął szereg przedsięwzięć dla zintensyfikowania wspólnych badań pracowników instytucji członkowskich Konsorcjum. Przyznano, w drodze konkursu, 3 granty wspomagające wspólne projekty pracowników Instytutu z badaczami z instytucji partnerskich obejmujących różną tematykę:

1. "Wpływ modyfikacji struktury interfejsu Fe-CoO na jego właściwości magnetyczne i elektronowe" (dr hab. Jacek Gurgul)
2. "Otrzymywanie wodoru z etanolu w obecności nowych katalizatorów opartych na solach żelaza heteropolikwasu 12-molibdofosforowego. Badanie stanu chemicznego oraz otoczenia kationów żelaza  $Fe^{2+}$  i  $Fe^{3+}$  metodami spektroskopii fotoelektronów XPS oraz spektroskopii Mössbauerowskiej" (dr Leszek Matachowski)
3. "Analiza strukturalna i funkcjonalna białek chaperonowych odpowiedzialnych za dojrzewanie metaloenzymów ze *Sterolibacterium denitrificans* i *Aromatelum aromaticum*" (dr Ewa Niedziałkowska)

Przyznano 6 rocznych stypendiów doktoranckich "Smoluchowski Doctoral Scholarships" szczególnie utalentowanym słuchaczom Międzynarodowego Studium Doktoranckiego Instytutu.

Instytut gościł, w charakterze profesora wizytującego, naukowców z zagranicy, którzy zaprezentowali wykłady oraz seminaria dla pracowników i doktorantów Konsorcjum. Goszczonymi naukowcami byli:

1. dr Maksymilian Chruszcz, Uniwersytet Południowej Karoliny, Columbia, USA
2. dr Eliza Garcia-Lopez, Uniwersytet w Palermo, Włochy
3. prof. Carmen Claver, Uniwersytet Rovira i Virgili w Tarragonie, Hiszpania.

Instytut w ramach działania Konsorcjum KNOW był współorganizatorem konferencji "5<sup>th</sup> Meeting X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage", zorganizowanej wraz z Wydziałem Chemii UJ, Muzeum UJ oraz Wydziałem Konserwacji i Restauracji Dzieł Sztuki ASP w Krakowie (14-17 maja 2014). Instytut bierze również udział w akcji FOKUS o nazwie "ArtMet" koordynowanej przez Wydział Chemii UJ i dotyczącej interdyscyplinarnych badań obiektów metalowych.



## **DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU**





## **Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju**



## 1. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych

*(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Elżbieta Bielańska, dr Roman Dula, dr Dorota Duraczyńska, dr Alicja Michalik-Zym, dr Małgorzata Zimowska, dr Katarzyna Pamin, dr Jan Połtowicz, mgr Daria Napruszewska)*

Celem badań było określenie wpływu warunków syntezy na właściwości fizykochemiczne montmorillonitu podpieranego tytanem (Ti-PILC) lub cyrkonem (Zr-PILC), w kontekście wykorzystania tych materiałów jako substancji wzorcowych dla układu nowego typu montmorillonitu podpieranego odczynnikiem o mieszanym składzie Ti-Zr. W szczególności, chodziło o stwierdzenie, czy zmiana ilości (mmol) odczynnika podpierającego w przeliczeniu na jednostkę masy smektytu, z wartości stosowanej w syntezie czysto tytanowych (ca. 10 mmoli/g montmorillonitu) lub czysto cyrkonowych form podpierzanych (ca. 5 mmoli/g montmorillonitu, do wartości charakterystycznej dla układu z mieszanym składem podpórek (5 mmoli Ti/ 5 mmoli Zr/g montmorillonitu), zmienia skład oraz właściwości strukturalne i teksturalne podpierzanych smektytów.

Do syntezy Ti-PILC i Zr-PILC wykorzystano wapniową formę montmorillonitu z Jelšovego Potoku (Słowacja), parametrem zmiennym był stosunek ilości mmoli Ti lub Zr w odczynniku podpierającym do masy smektytu (5 lub 10 lub mmoli na 1 g montmorillonitu), a w przypadku odczynnika tytanowego także stopień zakwaszenia (2 lub 4 ml stężonego HCl na 100 ml zolu). Właściwości otrzymanych materiałów scharakteryzowano metodami XRD, XRF, adsorpcji/desorpcji azotu w 77 K, oraz spektroskopią UV-VIS i Ramana.

Charakterystyka fizykochemiczna podpierzanych montmorillonitów wykazała, że w badanym zakresie zmienności stosunek Ti/montmorillonit lub Zr/montmorillonit nie wpływa w istotny sposób na rezultat podpierania, o ile w trakcie syntezy zachowane były identyczne warunki hydrolizy roztworu podpierającego, w szczególności stężenie, pH, temperatura i okres starzenia. W takich warunkach zarówno ilość wbudowanego materiału, jak i struktura oraz tekstura podpieranego smektytu pozostają praktycznie takie same. Wynika to z faktu, że zachowanie stałych warunków hydrolizy pozwala na uzyskanie roztworu podpierającego zawierającego oligogationy o takim samym stopniu polimeryzacji i takim samym ładunku. Tym samym, w trakcie procesu podpierania, mającego charakter wymiany jonowej, wbudowanie tytanu lub cyrkonu zależy w pierwszym rzędzie od pojemności wymiennej matrycy montmorillonitowej, a nie od względnego nadmiaru odczynnika podpierającego. Przeprowadzone badania wykazały, że dla mieszanego układu podpieranego [Ti,Zr]-PILC, przy którego syntezie ilość odczynnika podpierającego dobrano tak, by uzyskać stosunek 5 mmoli Ti/5 mmoli Zr/1 g montmorillonitu, referencyjnymi preparatami Ti-PILC lub Zr-PILC, mogą być zarówno układy otrzymane przy stosunku 5 mmoli/g montmorillonitu (Zr-PILC), jak i 10 mmoli na g montmorillonitu (Ti-PILC).

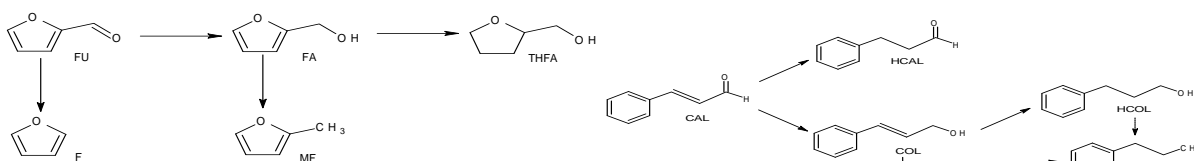
Uzyskane wyniki posłużą do optymalizacji metodyki podpierania minerałów warstwowych i opracowania ujednoczonej procedury otrzymywania materiałów referencyjnych typu podpierzanych smektytów.

## 2. Nowe źródła energii; materiały i procesy. Procesy katalityczne z udziałem bio-surowców.

### Rola brązów $H_xMoO_3$ i $H_yWO_3$ w selektywności uwodorniania $C=O/C=C$ w aldehydach nienasyconych na katalizatorach

(prof. Alicja Drelinkiewicz, dr Erwin Lalik, dr Robert Kosydar, dr Leszek Matachowski, mgr Michał Kołodziej, mgr Tomasz Szumelda, dr Aleksandra Pacuła)

Celem badań jest określenie roli wodoru w katalizatorach Pd zawierających brązy  $MoO_3$  i  $WO_3$  uwodorniania bio-surowca, furfuralu, prowadzącego do otrzymywania pochodnych furanu stanowiących bio-paliwa (2-metyltetrahydrofuran, 2-metylfuran (MF)).



Schemat reakcji uwodorniania furfuralu jest podobny do tego w trakcie uwodorniania  $\alpha,\beta$ -nienasyconych aldehydów, np. cynamonowego (CAL). W obydwu procesach reakcje równoległego uwodorniania  $C=C$  i  $C=O$  są dominujące.

Realizowane prace obejmowały uwodornienie obydwu aldehydów, FU i CAL (20-60°C, 1-6 atm  $H_2$ , toluen) w obecności dwu serii katalizatorów Pd. Seria I to katalizatory Pd/ $MoO_3$  i Pd/ $WO_3$ , syntezowane przez osadzenie cząstek Pd na nośniki metodami odwróconej mikroemulsji (water-in-oil) oraz impregnacji roztworami  $PdCl_2$  (wodny) i  $Pd(ac)_2$  (w acetonie), redukcja  $H_2$  250°C, 3h. Seria II to katalizatory Pd/P- $MoO_3$  i Pd/P- $WO_3$ , które uzyskano przez prażenie w powietrzu (20 h, 700°C) soli Pd  $H_3PMo_{12}O_{40}$  i  $H_3PW_{12}O_{40}$ . Katalizatory charakteryzowano metodami BET, XRD, XPS, SEM (EDS).

Uzyskane wyniki pokazały (mikrokalorymetria) zdolność do absorpcji wodoru w temp. 25°C równą 0.32 H/ $WO_3$  i 1.75H/ $MoO_3$  wynikająca z tworzenia brązów. W reakcji uwodorniania CA i FU, katalizatory serii I, charakteryzujące się cząstkami Pd były bardziej efektywne. Ich właściwości katalityczne porównano z Pd/ $SiO_2$ . W reakcji uwodorniania CA, aktywność malała w szeregu Pd/ $WO_3$  > Pd/ $SiO_2$  > Pd/ $MoO_3$ . Selektywność uwodorniania  $C=O$  dla Pd/ $WO_3$  (33 %) i Pd/ $MoO_3$  (58 %) była wyższa niż dla Pd/ $SiO_2$  (15%) co wiązano z efektem SMSI nośników  $MoO_3$  i  $WO_3$ . Tworzenie brązów w reakcji uwodorniania potwierdzono metodą XRD. Efekt „spill-over” wodoru w  $WO_3$  i  $MoO_3$  (tworzenie brązów) powodował wzrost selektywności uwodorniania  $C=C$ , w reakcji na Pd/ $SiO_2$  jak i Pd/ $WO_3$  i Pd/ $MoO_3$ . W reakcji uwodorniania furfuralu (FU) aktywność i selektywność katalizatorów Pd/ $MoO_3$  i Pd/ $WO_3$  różniły się od Pd/ $SiO_2$ . Obydwa katalizatory były mniej aktywne od Pd/ $SiO_2$ . Podobnie jak w reakcji uwodorniania aldehydu cynamonowego, efekt "spill-over" wodoru powodował znaczące zmiany aktywności i selektywności reakcji zarówno w obecności Pd/ $SiO_2$  jak i Pd/ $WO_3$  i Pd/ $MoO_3$  promując uwodornianie  $C=C$  oraz dekarbonylację furfuralu (Pd/ $MoO_3$ ) z utworzeniem furanu (F). Obserwowany wpływ efektu "spill-over" wodoru na selektywność badanych reakcji wiązano z geometrią adsorpcji cząsteczek aldehydów FU/CAL na centrach katalizatorów. Do badania katodowej elektroredukcji tlenu, procesu zachodzącego w ogniwie paliwowym stosowano katalizatory Pd/P- $MoO_3$  i Pd/P- $WO_3$ , które osadzone zostały na węglu przewodzącym Vulcan XC72. Katalizatory te przygotowano metoda impregnacji węgla solami palladu i prażenia 20 h, 700°C. Jednakże filmy (kompozyty z Nafionem o zmiennym stosunku) osadzone na powierzchni elektrody węglowej ulegały mechanicznej destrukcji w trakcie pomiaru elektroredukcji tlenu, co uniemożliwiło przeprowadzenie zasadniczych pomiarów.

Uzyskany efekt "spill-over" wodoru jest całkowicie nowym zagadnieniem, które jest interesujące i stanowi podstawę dla kontynuacji badań.

### **3. Badania nad przeróbką alkoholu furfurylowego w kierunku bio-komponentów do paliw i tworzyw sztucznych**

*(dr Dorota Rutkowska-Żbik, dr hab. Ryszard Grabowski prof. IKiFP, dr Tadeusz Machej, dr Michał Śliwa, dr Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, mgr Wojciech Rojek)*

Celem było znalezienie i optymalizacja składu katalizatora do reakcji hydrogenolizy alkoholu furfurylowego do 2-metylofuranu (DMF).

Jako wstępną grupę katalizatorów do zaplanowanych badań wytypowano chromity Ni, Cu, Co, Fe, Mn. Chromity Ni, Co, Fe i Cu otrzymano metodą cytrynianową, natomiast chromit Cu zsyntetyzowano dodatkowo "metodą Adkinsa". Przeprowadzono podstawową charakterystykę fizykochemiczną badanych katalizatorów. Ich skład fazowy potwierdzono metodą XRD, powierzchnie właściwe określono metodą BET, a redukowalność metodą H<sub>2</sub>-TPR. Otrzymane próbki poddano testom katalitycznym w procesie hydrogenolizy alkoholu furfurylowego, w reaktorze przepływowym pod ciśnieniem atmosferycznym, w zakresie temperatur 150-400°C. Mierzono selektywności do produktów hydrogenolizy furfurołu – pożądaných (2-metylofuranu i furanu) oraz produktów ubocznych (metanu, etanu i butanu). Najbardziej obiecujące katalizatory scharakteryzowano dodatkowo metodą XPS, w celu precyzyjnego określenia składu oraz stopnia utlenienia metalu fazy aktywnej.

Konwersja alkoholu furfurylowego na wszystkich badanych katalizatorach wynosiła powyżej 99%. Na chromitach Ni, Co, Mn głównymi produktami reakcji były metan, etan i butan. Głównym produktem reakcji katalizowanej przez chromit miedziowy był furan (wydajność 100% w zakresie temperatur 250-350°C). Natomiast najbardziej obiecującym katalizatorem był chromit żelaza, osiągający wydajność do 2-metylofuranu 80% w temperaturze 250°C. Aby określić, czy aktywność katalityczna jest związana wyłącznie z komponentem żelazowym, zsyntetyzowano katalizator Fe/SiO<sub>2</sub> i zmierzono jego aktywność w badanej reakcji. Otrzymana próbka osiągała jednak niskie wydajności do DMF, co świadczy o istotnej roli struktury chromitu lub/i jonów chromu oraz ich wpływie na obserwowaną reaktywność. Aktywność katalityczną powiązano z redukowalnością katalizatorów, zmierzoną metodą H<sub>2</sub>-TPR. Najlepszy układ spośród badanych, FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, jest redukowalny w zakresie temperatur 150-400°C. Stwierdzono, że katalizatory, które nie są redukowalne w zakresie temperaturowym zbliżonym do temperatur reakcji katalitycznej, nie wykazują wysokiej wydajności do produktu pożądanego, jakim jest DMF.

Główny, pożądaný produkt hydrogenolizy alkoholu furfurylowego, jakim jest 2-metylofuran, stanowi atrakcyjny dodatek do benzyny; jego właściwości przewyższają 2-metylotetrahydrofuran, związek już figurujący na liście dopuszczonych przez Departament Energii USA dodatków do benzyny. Znalezienie, charakterystyka fizykochemiczna i optymalizacja składu katalizatora umożliwiającego uzyskiwanie z dużą wydajnością 2-metylofuranu stanowić będzie istotny wkład w prowadzone na całym świecie badania zmierzające do efektywnego pozyskiwania tego bio-komponentu benzyny z biomasy.

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

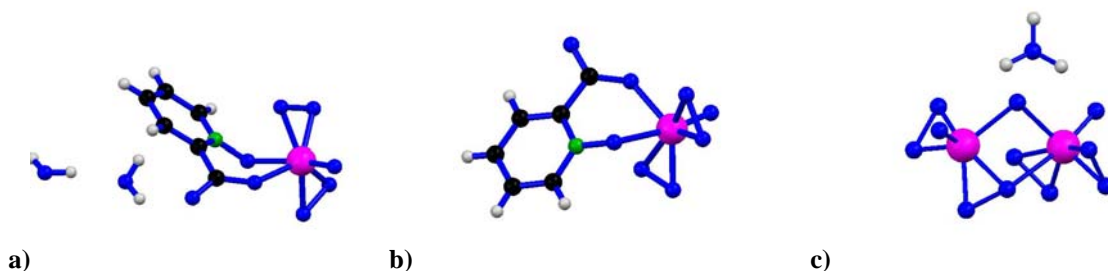
(prof. Wiesław Łasocha, dr Dariusz Mucha, dr Anna Szymańska, dr Katarzyna Luberda-Durnaś, dr Marta Grzesiak-Nowak, Adrianna Borowiec)

Prowadzone badania dotyczyły syntez oraz badań strukturalnych nowych nadtlenowych związków Mo i V, jako ligandy organiczne stosowano kwas nikotynowy i pikolinowy, jako kationy Na, K, Rb, Cs oraz sprotonowany 1,3-diaminopropan. Dla kilku wcześniej uzyskanych polioksomolibdenianów przeprowadzono testy katalitycznego utleniania limonenu.

Wyniki badań:

1. Przeprowadzono szereg syntez związków typu perokso- z kwasem nikotynowym, oraz pikolinowym. Ponieważ zauważono, iż w tworzone związki wbudowuje się grupa N-tlenku pirydyny, w części syntez zastosowano N-tlenek kwasu nikotynowego (nic-O), N-tlenek kwasu pikolinowego (pic-O) oraz  $\text{Na}_2\text{MoO}_4$  i  $\text{K}_2\text{MoO}_4$  jako źródła molibdenu. Uzyskano monokryształy  $\text{Na}(\text{pic-O})\text{MoO}(\text{O}_2)_2$ , oraz sól potasową  $\text{K}(\text{pic-O})\text{MoO}(\text{O}_2)_2$ . Rozwiązano struktury obu połączeń (Rys. a i b). Stosując N-tlenek kwasu nikotynowego uzyskano polikrystaliczną sól potasową, podobną do odpowiedniej soli amonowej, o cyklicznym anionie dwurdzeniowym. Struktura tej soli jest w trakcie udokładniania metodą Rietvelde.
2. Prowadzono badania nad uzyskaniem nowych peroksowanadanów. Prowadzono syntezę związków rubidu i cezu w środowiskach o pH zasadowym. Uzyskano krystaliczną formę oksodiperoksowanadanu cezu dla której zakończono badania strukturalne (Rys. c).
3. Prowadzono badania nad uzyskaniem peroksowanadanów 1,3-diaminopropanu; jako środek zwiększający pH stosowano nadmiar aminy lub amoniak. W stosowanych warunkach obserwowano powstawanie znanych wanadanów amonu oraz diwanadanów 1,3-diaminopropanu.
4. Dla kilku związków z grupy polioksomolibdenianów, otrzymanych w latach ubiegłych, przeprowadzono testy katalitycznego utleniania limonenu przy użyciu tlenu z powietrza (wykonywane we współpracy z grupą dr Jana Połtowicza i dr Katarzyny Pamin). Badane związki okazały się aktywne, wyniki badań wskazują iż związki polimeryczne preferują powstawanie epoksydów, związki warstwowe preferują tworzenie ketonu (karwonu).

Rysunek przedstawia udokładnioną jednostkę asymetryczną: **a)**  $\text{Na}(\text{pic-O})\text{MoO}(\text{O}_2)_2$ , **b)**  $\text{K}(\text{pic-O})\text{MoO}(\text{O}_2)_2$ , **c)** diwanadanu tricezowego. Kolory fioletowy, zielony, czarny, niebieski i szary oznaczają odpowiednio molibden, azot, węgiel, tlen i wodór.



Otrzymano oraz wyznaczono struktury krystaliczne 3 nowych perokso-molibdenianów, oraz jednego peroksowanadanu. Dla kilku polioksomolibdenianów wykonano testy katalitycznego utleniania. Związki perokso-, warstwowe oraz polimeryczne molibdeniany różni aktywność, jak i selektywność w procesie utleniania limonenu.

Badane związki to potencjalne katalizatory w procesach utleniania związków organicznych (głównie węglowodorów), pod kątem uzyskiwania użytecznych produktów (kwasów organicznych, epoksydów, ketonów).

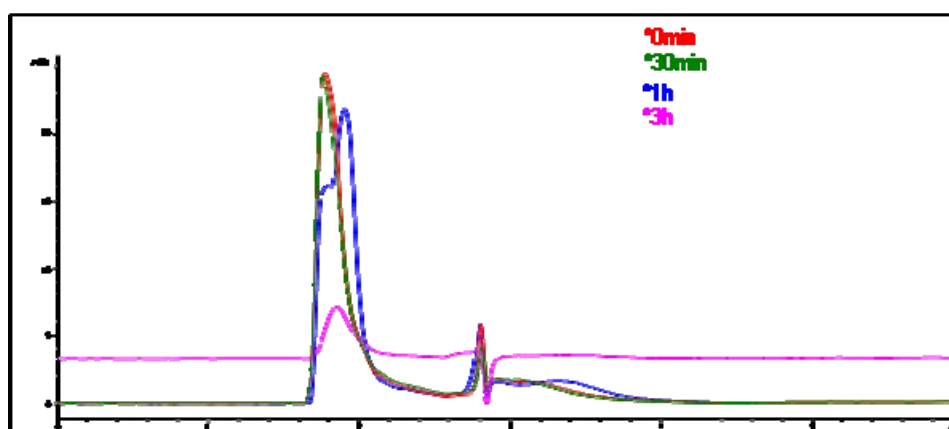
## 5. Procesy fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza – analiza produktów degradacji. Substancje humusowe - trudny substrat dla procesów fotokatalitycznego oczyszczania wody

(prof. Piotr Warszyński, dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP, z zespołem)

Fotokataliza heterogeniczna jest oszczędną i bezpieczną dla środowiska technologią zaawansowanego utleniania, w celu usunięcia organicznych zanieczyszczeń z wody, dlatego jest coraz częściej stosowana w procesach jej oczyszczania i uzdatniania. Substancje humusowe należą do kategorii tzw. trudno usuwalnych zanieczyszczeń organicznych, które mogą być eliminowane na drodze poprzez fotokatalityczne utlenianie.

W 2014 roku prace skoncentrowane były na badaniu rozkładu modelowych związków organicznych, kwasów humusowych, 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). Wyniki przeprowadzonych analiz wskazały, że przy równoczesnym zastosowaniu fotokatalizatora ( $\text{TiO}_2$ ) i utleniacza – nadsiarczanu sodu następuje konwersja substancji organicznej, jednakże analiza OWO wykazała istnienie znacznej ilości węgla organicznego, czyli prowadzony proces nie prowadził do całkowitej mineralizacji kwasu humusowego. Pomiar przeprowadzone przy zastosowaniu chromatografii HPLC-MS pozwoliły jedynie na potwierdzenie istnienia produktów pośrednich rozkładu związków humusowych. Przykładowe widma HPLC zostały zilustrowane na Rysunku 1, gdzie porównano zmiany kształtu pików zarejestrowane dla czterech różnych próbek: bez naświetlania, po 30 min, 60 min i 180 min naświetlania UV w zawiesinie  $100 \text{ mg/dm}^3 \text{ TiO}_2$ .

Przeprowadzone pomiary potwierdzają jedynie, iż w miarę wydłużania czasu naświetlania próbek promieniowaniem UV zarejestrowane maksima pików ulegają obniżeniu, co może świadczyć o rozkładzie kwasów humusowych do prostszych komponentów, jednakże ich zidentyfikowanie okazuje się na tym etapie niemożliwe. Prawdopodobnie w procesie fotokatalitycznym rozkładane są barwne, aromatyczne komponenty a produktami są prostsze kwasy organiczne. Należy wziąć to pod uwagę w dalszych pracach dotyczących zastosowania fotokatalizy w procesie usuwania zanieczyszczeń organicznych z wody.



Rysunek 1. Chromatogramy zarejestrowane przy długości fali wzbudzenia detektora DAD 254,4 nm, przy tych samych czasach retencji dla roztworów kwasów humusowych  $40 \text{ mg/dm}^3$  w zawiesinie  $100 \text{ mg/dm}^3 \text{ TiO}_2$  po 0 min, 30 min, 1h i 3h naświetlania promieniowaniem UV



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

### **Modyfikacja stanów spinowych i aktywności katalitycznej centrów kobaltowych w zeolitach przez koadsorpcję amoniaku**

*(prof. Ewa Broclawik, prof. Bogdan Sulikowski, dr Ewa Włoch, mgr Jerzy Podobiński)*

Badania kwantowo-chemicznych prowadziły do wyznaczenia charakteru przepływu ładunku pomiędzy kationowymi centrami w zeolitach modyfikowanych amoniakiem a sorbowaną cząsteczką NO i jego wpływu na aktywację substratu. Celem badań eksperymentalnych było określenie zależności pomiędzy modyfikacją zeolitów typu fojazytu (w zakresie zawartości Si oraz Al) a ich aktywnością i selektywnością w procesie transformacji  $\alpha$ -pinenu.

Określono zależność charakteru kanałów przepływu elektronów pomiędzy ligandami donorowymi ( $\text{NH}_3$ ) a układem Co(II)-NO od ich liczby oraz stanu elektronowego układu. Otrzymano w oparciu o zeolit typu Y serię preparatów modyfikowanych na drodze wymiany jonowej i kalcynacji w szerokim zakresie temperatur. Próbki scharakteryzowano metodami: XRD, adsorpcji azotu, spektroskopii w podczerwieni i spektroskopii NMR w ciele stałym dla jąder  $^{29}\text{Si}$  i  $^{27}\text{Al}$ . Do wybranych próbek wprowadzono dodatkowe, określone ilości glinu metodą wymiany jonowej w ciele stałym. Wykonano wstępne eksperymenty mające na celu wygenerowanie w zeolitach dodatkowego systemu mezoporów. Badania fizykochemiczne skorelowano z aktywnością katalityczną w procesie izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu. Wykonano analogiczne badania dla mezolitu (zeolitu o strukturze NAT) i skorelowano parametry geometryczne sieci glinokrzemianowej z widmami  $^{29}\text{Si}$  i  $^{27}\text{Al}$  NMR o wysokiej rozdzielczości. Przypisano jakościowo i ilościowo wszystkie sygnały krzemowe do odpowiednich ugrupowań.

Wyniki badań teoretycznych, ściśle skorelowane z danymi spektroskopii w podczerwieni pozwoliły na pełne wyjaśnienie oraz nową interpretację widm IR dla kobaltowych form zeolitu typu MFI, fojazytu i mordenitu. Ilościowa dekonwolucja widm NMR pozwoliła na ściśle określenie statusu krzemu i glinu w próbkach. Wykazano zachodzenie transformacji sieci glinokrzemianowej w funkcji temperatury i warunków kalcynacji podczas dealuminiowania. Przy użyciu dwuwymiarowych widm NMR określono status glinu w preparacie wyjściowym oraz po dealuminiowaniu.

Wobec światowych trendów badań nad mechanizmami zjawisk katalitycznych najważniejszym wynikiem teoretycznym jest wykazanie roli polaryzacji spinowej w procesach transferu ładunku, co może mieć ogromne znaczenie w katalizie spinowej. Po raz pierwszy w literaturze światowej wykazano także, że trzy rodzaje glinu sieciowego w mezolicie można uwidocznić za pomocą metody  $^{27}\text{Al}$  3MQ MAS NMR.

## 7. Nowe materiały katodowe dla wysokotemperaturowych ogniw paliwowych.

### Nowy kompozytowy materiał na katodę w wysokotemperaturowych ogniwach paliwowych na osnowie kobaltanu samaru i strontu

*(dr Michał Mosiałek, dr hab. Paweł Nowak prof IKiFP, mgr Maciej Tatko, mgr Aneta Kędra, dr Grzegorz Mordarski, dr Elżbieta Bielańska)*

Celem realizacji zadania było opracowanie nowych materiałów na katodę w wysokotemperaturowym ogniwie paliwowym, wykazujących lepsze właściwości w porównaniu do stosowanych obecnie.

Wykonano syntezę kobaltanu samaru strontu  $\text{Sm}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{CoO}_3$  (SSC) metodą Pechinniego. Otrzymano mono-fazowy preparat w postaci proszku o strukturze perowskitu. Z tego preparatu i żelazianu lantanu strontu  $\text{La}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{FeO}_{3-\delta}$  (LSF) zostały sporządzone porowate spieki i pasty w proporcjach wagowych SSC:LSF: 3:7, 5:5 i 7:3 (pasty zawierały dodatkowo wiążący czynnik organiczny). Spieki zostały wykorzystane do wyznaczenia porowatości i współczynników rozszerzalności termicznej nowych materiałów. Elektrody zostały wykonane poprzez naniesienie pasty metodą sitodruku i spieczenie w zadanej temperaturze na dyskach elektrolitu, tlenku ceru samaru  $\text{Ce}_{0,8}\text{Sm}_{0,2}\text{O}_{1,9}$  (SDC). Wykonane zostały również katody z dodatkiem tlenków renu. Aktywność katalityczną katod z nowych materiałów w reakcji redukcji tlenu zbadano metodami woltamperometrii cyklicznej i elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej. Trwałość otrzymanych katod była testowana w dwumiesięcznych testach polegających na cyklicznym gwałtownym ochładzaniu i rozgrzewaniu do temperatury pracy  $700^\circ\text{C}$ , połączonych z badaniami impedancyjnymi.

Zaproponowano nowe podejście w badaniach nad otrzymywaniem materiałów katodowych o obniżonym współczynniku rozszerzalności cieplnej, polegające na zastosowaniu kompozytu składającego się z dwóch materiałów katodowych, z których jeden wykazuje niski współczynnik rozszerzalności cieplnej a drugi charakteryzuje się wysoką aktywnością katalityczną. Testowane materiały katodowe charakteryzują się porównywalną do najczęściej stosowanych materiałów aktywnością katalityczną w reakcji redukcji tlenu, równocześnie ich współczynnik rozszerzalności cieplnej ma wartość zbliżoną do współczynnika rozszerzalności cieplnej elektrolitu, co zapewnia większą trwałość sporządzonych z nich katod. Zarówno SSC jak i LSF mają wysokie przewodnictwo elektronowe, dzięki czemu w ich przypadku, pomimo pojawiania się mikropeknięć, nie następuje wyłączenie fragmentów struktury z udziału w reakcji redukcji tlenu, w przeciwieństwie do innych opisywanych w literaturze kompozytów. W testach trwałości wykazaliśmy, że pomimo drastycznego traktowania nie następuje spadek aktywności katalitycznej materiału katodowego. Najlepszymi właściwościami katalitycznymi charakteryzowały się katody o stosunku SSC do LSF 1:1. Wykazano, że obecność srebra w kolektorze prądu znacznie obniża opór polaryzacyjny takich katod w zakresie niskich stężeń tlenu. Dodatek tlenków renu nie poprawia własności katalitycznych badanych materiałów.

Opisane materiały katodowe mogą zostać zastosowane w wysokotemperaturowych ogniwach paliwowych.



**Fizykochemia powierzchni i nanostruktur  
- eksperyment i teoria**



## 8. Badania teoretyczne aktywności katalitycznej katalizatorów tlenkowych ze szczególnym uwzględnieniem heteropolizwiązków

(prof. Małgorzata Witko, dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof IKiFP, dr Robert Gryboś, mgr Piotr Niemiec)

Celem badań był opis oddziaływania modyfikowanych heteropolikwasów (HPA) z biorącymi udział w reakcji selektywnego utleniania ugrupowaniami tlenowymi. Układy w których w pozycji kationu kompensującego lub jednego z atomów addenda występuje metal przejściowy inny niż Mo/W z powodzeniem stosowane są w reakcjach selektywnego utlenienia nasyconych i nienasyconych węglowodorów łańcuchowych i cyklicznych, zarówno w katalizie homogenicznej jak i heterogenicznej, gdzie wymagana jest obecność reaktywnych ugrupowań tlenowych (ROS) takich jak np. tlen singletowy  $O_2$ , jony superokso  $O_2^-$ , rodniki hydrokso czy hydroperokso (odpowiednio  $HO\cdot$  czy  $HOO\cdot$ ).

W prezentowanej pracy przedstawiono wstępne wyniki modelowania procesu aktywacji cząsteczki  $O_2$  i jonu  $OOH^-$  (powstałego w wyniku dysocjacji  $H_2O_2$ ) na heteropolikwasach molibdenowych i wolframowych o strukturze anionu Keggina  $P(Mo/W)_{11}TMO_{39}^{n-}$ , w których jeden z atomów addenda (Mo lub W) podstawiony został przez atom innego metalu przejściowego (TM =  $Mn^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Co^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$ ). Dodatkowo przeprowadzono modelowanie procesu aktywacji ugrupowań tlenowych na kationach  $Co^{2+}$  w środowisku wodnym i w acetonitrylu. Obliczenia klasterowe przeprowadzono programem Turbomole, stosując funkcjonal gradientowy PBE, w bazie TZVP, uwzględniając efekt rozpuszczalnika (wody, acetonitrylu) poprzez zastosowanie modelu COSMO. Badane układy scharakteryzowano w oparciu o wyznaczoną analizę populacyjną centrów aktywnych, rzędy i długości wiązań, orbitale graniczne oraz gęstości spinowe. W celu wyjaśnienia różnic w aktywności różnych metali przejściowych wykorzystano analizę NOCV.

Wyniki obliczeń pokazują, że tlen molekularny adsorbuje się wyłącznie na modyfikowanych heteropolikwasach, w których obecne są jony  $Mn^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $Co^{2+}$  oraz  $Ni^{2+}$ . Wyznaczone energie adsorpcji  $O_2$  wynoszą  $\sim -0.5$  eV. Tlen tworzy z jonami metalu pojedyncze wiązanie Me-O o długości  $\sim 1.9$  Å. Wyniki analizy NOCV wskazują na aktywację cząsteczki  $O_2$ . W przypadku oddziaływania tlenu molekularnego z jonami  $Cu^{2+}$  i  $Zn^{2+}$ , jako atomami addenda, obserwujemy wyłącznie fizysorpcję. Cząsteczka  $O_2$  wiąże się z anionami Keggina z energią  $-0.07$  i  $-0.12$  eV (odpowiednio dla układów z Cu i Zn), zachowując odległość Cu/Zn-O równą  $2.66/2.48$  Å. Na kationach  $Co^{2+}$  skoordynowanych z wodą lub acetonitrylem, adsorpcja cząsteczki  $O_2$  zachodzi z mniejszą energią  $\sim -0.3$  eV. Porównanie procesu oddziaływania układów z kobaltem (wbudowanym w strukturę anionu Keggina molibdenową czy wolframową, bądź skoordynowanych z cząsteczkami rozpuszczalnika) prowadzi do wniosku, że etapem różnicującym te układy jest min. etap wymiany ligandów (rozpuszczalnik-cząsteczka  $O_2$ ).  $\Delta G$  reakcji wynoszą odpowiednio  $26.96$  eV  $46.71$  i  $65.61$  odpowiednio dla układów ( $HPMoCo-CH_3CN + O_2$ ,  $HPWCo-CH_3CN + O_2$ ,  $Co-6CH_3CN + O_2$ ), co sugeruje że proces ten najłatwiej zachodzi w układach gdzie  $Co^{2+}$  wbudowany jest w strukturę molibdenowego anionu Keggina. Inny obraz otrzymujemy w przypadku adsorpcji  $OOH^-$ . W odróżnieniu od cząsteczki  $O_2$ ,  $OOH^-$  anion adsorbuje się na wszystkich badanych układach. Wyznaczone energie adsorpcji mieszczą się w granicach od  $-4.8$  do  $6.0$  eV. Jon  $OOH^-$  wiąże się z jonami metali wiązaniem o długości  $\sim 1.90$  Å i rzędzie wiązania od  $0.86$  do  $1.19$ . Wyniki analizy populacyjnej wykonane dla badanych układów (długości wiązań O-O  $\sim 1.40$  Å i rzędy wiązań mieszczące się w granicach od  $0.86$  do  $1.14$ ) wskazują na aktywację wiązania O-O.

Otrzymane wyniki stanowią bazę do dalszych obliczeń, które pozwolą na wyznaczenie barier aktywacji w kolejnych etapach reakcji selektywnego utleniania np. na etapie oddziaływania z cząsteczką węglowodorów. Docelowo mają wskazać różnice w aktywności katalitycznej heteropolikwasów modyfikowanych różnymi metalami przejściowymi.

## 9. 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 hab. Jacek Gurgul, dr Robert Socha, dr Dorota Wilgocka-Ślęzak, dr Ewa Madej, dr Kinga Freindl, mgr Barbara Wolanin (Figarska), mgr Tomasz Giela [współpraca z WFiIS AGH])

Celem badań było wszechstronne zrozumienie właściwości nanostruktur epitaksjalnych, metalicznych i tlenkowych otrzymywanych w warunkach ultra wysokiej próżni, wytwarzanych i badanych pod kątem zastosowań katalitycznych i magnetycznych. Poprzez zastosowanie kompleksowych metod charakteryzacji strukturalnej i magnetycznej poszukiwano korelacji struktura – funkcjonalność. 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.

Najważniejsze realizowane prace dotyczyły:

- właściwości warstw granicznych w magnetycznych nanostrukturach metal-tlenek,
- wytwarzanie i charakteryzacja supersieci metal-tlenek o unikalnych właściwościach transportowych i magnetycznych,
- zastosowanie spektro-mikroskopii elektronowej w badaniach nanostruktur epitaksjalnych,
- właściwości strukturalne metalicznych warstw na podłożach monokrystalicznych W(110) i MgO(100),
- nanostruktur Au na powierzchni  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ ,
- właściwości elektronowych materiałów objętościowych aktywnych w reakcjach chemicznych.

W układach dwuwarstwowych CoO-Fe o orientacji (001) zbadano wpływ struktury i składu warstwy granicznej na sprzężenie wymienne typu ‘exchange bias’ (EB). Poprzez preparatykę warstwy CoO w różnych warunkach tlenowych uzyskano warstwy graniczne o różnej stechiometrii tlenu scharakteryzowanej przy użyciu spektroskopii mössbauerowskiej. Stwierdzono ścisłą korelację pomiędzy grubością granicznej warstwy tlenku, a zjawiskiem EB.

W trój- i wielowarstwowych układach na bazie Fe-MgO badano sprzężenie magnetyczne pomiędzy warstwami Fe. W trój-warstwach Fe-MgO-Fe stwierdzono obecność antyferromagnetycznego oddziaływania wymiennego dla warstw MgO tak cienkich jak 2 Å. Na bazie tych wyników wytworzono supersieci Fe-MgO, w których dla odpowiednich grubości podwarstw można było ustabilizować daleko zasięgowy porządek magnetyczny oraz wyraźną prostopadłą składową namagnesowania w temperaturze pokojowej. Właściwości te wyjaśnione zostały w oparciu o worteksową strukturę domenową potwierdzoną symulacjami mikromagnetycznymi.

Układy typu Fe-MgO są perspektywiczne z punktu widzenia możliwości sterowania właściwościami magnetycznymi poprzez zewnętrzne pole elektryczne. W tym celu dokonano odpowiedniej strukturyzacji warstw i podjęto pomiary transportu.

Kontynuując badania strukturalne epitaksjalnych układów tlenkowych i metalicznych przeanalizowano adsorpcję złota na powierzchni magnetytu o różnych terminacjach. Optymalizowano epitaksjalny wzrost manganu na powierzchni MgO(001) oraz złota na powierzchni W(110).

Badano układy katalityczne typu Cu/ZrO<sub>2</sub> do reakcji uwodornienia CO<sub>2</sub> do metanolu uzyskane poprzez impregnację ZrO<sub>2</sub> solami miedzi i kompleksowanie kwasem cytrynowym. Do analizy składu powierzchni, stanów elektronowych pierwiastków na powierzchni oraz redukowalności podłoża ZrO<sub>2</sub> dla próbek przed reakcją oraz po redukcji wodorem, zastosowano spektroskopię fotoelektronów wzbudzanych promieniowaniem X (XPS) i spektroskopię elektronów

Augera (XAES). Badania wskazały na obecność wakancji tlenowych w strukturze  $ZrO_2$ . Dla wszystkich nieredukowanych katalizatorów, stosunek intensywności satelitów typu *shake-up* do intensywności odpowiednich wzbudzeń fotoelektronowych (wspartych wartościami tzw. parametru Augera), zasugerował znaczący udział jonów  $Cu^{2+}$  w składzie badanych powierzchni. Stwierdzono, że wybór sposobu preparatyki katalizatorów wpływa na sposób dyspersji miedzi, jej stan elektronowy i zawartość polimorficznych faz tlenku cyrkonu. Obecność wakancji tlenowych stabilizowała zarówno termodynamicznie niestabilną fazę t- $ZrO_2$  jak i kationy  $Cu^+$ , które lokowały się w pobliżu wakancji tlenowych.

Wyniki badań z użyciem mikroskopu PEEM zostaną wykorzystane przy uruchomieniu linii eksperymentalnej polskiego synchrotronu "Solaris". Badania struktury i reaktywności powierzchniowej przyniosły nową wiedzę użyteczną dla poznania mechanizmów reakcji katalitycznych i projektowania nowych katalizatorów o określonych właściwościach.

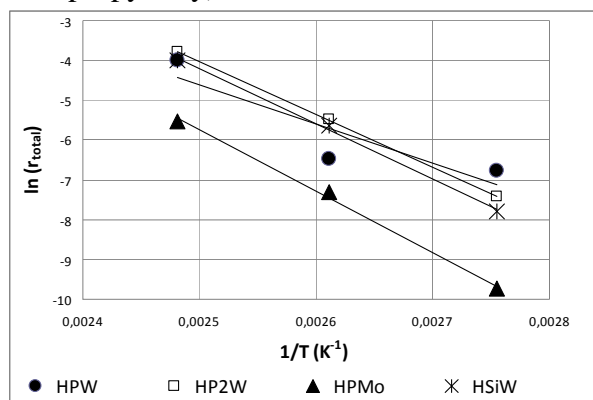


## 10. Konwersja alkoholi na katalizatorach kwaśnych, jako metoda określania właściwości kwasowych

(prof. Adam Bielański, dr hab. Anna Micek-Ilnicka, dr Urszula Filek, mgr Aleksandra Kirpsza)

Właściwości katalityczne heteropolizwiązków, stosowanych jako katalizatory w reakcjach kwasowo-zasadowych, silnie zależą od ich mocy kwasowej. Dobranie katalizatora charakteryzującego się znaczną kwasowością jest możliwe poprzez zastosowanie szybkiej metody jej oznaczania. Jedną z metod określania kwasowości jest przeprowadzenie tzw. reakcji testowych. Celem badań było sprawdzenie przydatności reakcji konwersji zarówno alkoholu etylowego, jak i izopropylowego jako reakcji testowych w badaniach kwasowości preparatów.

Testom katalitycznym konwersji etanolu i izopropanolu poddano serię heteropolikwasów:  $H_3PW_{12}O_{40}$  (HPW),  $H_3PMo_{12}O_{40}$  (HPMo),  $H_4SiW_{12}O_{40}$  (HSiW),  $H_6P_2W_{18}O_{62}$  (HP2W). Dodatkowo przetestowano zsyntetyzowane układy hybrydowe, zawierające  $H_3PW_{12}O_{40}$  naniesiony w ilości 1 monowarstwy na tlenki:  $SiO_2$  i  $TiO_2$ . Reakcje konwersji etanolu przebadano w zakresie temperatur 90-90°C, z kolei reakcję konwersji izopropanolu w zakresie 60-120°C. W reakcjach konwersji zarejestrowano węglowodory: (etylen, propylen) oraz etery (etar dietylowy, eter diizopropylowy).



Reakcje konwersji alkoholi badano stosując analizę chromatograficzną i spektroskopię w podczerwieni (FTIR). Katalizatory przed właściwą reakcją poddawano odwodnieniu *in-situ* we wnętrzu reaktorów. W pierwszym przypadku używano reaktora przepływowego. Z kolei komora do badań IR pełniła rolę *batch* reaktora. Stosując obie techniki monitorowano w sposób ciągły oddziaływanie etanolu i izopropanolu ze stałymi katalizatorami, obserwując powstawanie kolejnych produktów konwersji. Wyznaczono zależności szybkości reakcji konwersji  $r$  obu alkoholi od

temperatury reakcji (rysunek). Na podstawie tych przebiegów wyliczono energię aktywacji reakcji konwersji alkoholi, co pozwoliło określić szereg mocy kwasowej heteropolikwasów. Podobną procedurę, dotyczącą testów katalitycznych i obliczeń, zastosowano do materiałów hybrydowych typu heteropolikwas-tlenek ( $H_3PW_{12}O_{40}/SiO_2$ ,  $H_3PW_{12}O_{40}/TiO_2$ ). Równoległe techniką mikrokalorymetryczną wykonano pomiary kwasowości, obejmujące zarówno pomiary ich mocy kwasowej jak i ilości centrów aktywnych, poprzez sorpcję amoniaku w temperaturze pokojowej. Stosując reakcje testowe otrzymano szereg kwasowości heteropolikwasów identyczny jak szereg uzyskany z pomiarów mikrokalorymetrycznych.

Ustalono szereg kwasowości heteropolikwasów stosując mikrokalorymetryczne pomiary sorpcji amoniaku. Udowodniono przydatność reakcji konwersji alkoholu etylowego i izopropylowego, jako reakcji testowych, do badań kwasowości stałych katalizatorów.

## 11. Mechanizmy reakcji enzymatycznych i biomimetycznych - badania teoretyczne.

### Rola katalitycznie nieaktywnej domeny N-końcowej w funkcjonowaniu dioksygenazy katecholowej

(dr hab. Tomasz Borowski prof IKiFP)

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.

Z wykorzystaniem metod chemii kwantowej (DFT) oraz klasycznych symulacji dynamiki molekularnej przebadano dwa układy: 2,3-dioksygenazę katecholową (C23O) oraz kofaktor żelaza niehemowego (NHI) w centrum fotosyntetycznym z bakterii *Rhodobacter sphaeroides*.

W strukturze enzymu C23O wyróżnia się katalityczną domenę C-końcową oraz domenę N-końcową, która jak dotąd nie ma przypisanej funkcji. Zagadkową była więc obserwacja, że mutacja punktowa w obrębie domeny N-końcowej (M65T) zmienia zarówno optimum pH, jak i preferencję substratową enzymu. Wyniki przeprowadzonych symulacji pozwoliły na wytłumaczenie tego zjawiska: zastąpienie metioniny w pozycji 65 przez treoninę skutkuje znacznie mocniejszym (2 wiązania wodorowe zamiast jednego) oddziaływaniem C-końca białka z domeną N-końcową, co przekłada się na ograniczoną mobilność fragmentu białka pełniącego rolę bramki do miejsca aktywnego. Zmiana optimum pH do wartości 4 związana jest z protonacją C-końcowej grupy karboksylowej osłabiającej oddziaływanie z T65 i zwiększającej mobilność bramki; zmiana pH wpływa na różnicę w oddziaływaniach między C23O a katecholem i 4-chlorokatecholem.

Dynamika kofaktora NHI została uprzednio zbadana przy pomocy spektroskopii NRVS w grupie prof. K. Burdy. W celu interpretacji otrzymanych widm przeprowadziliśmy szereg obliczeń DFT (dla stanów o różnej multipletowości) celem optymalizacji struktury dla modeli NHI oraz wyznaczenia drgań normalnych oraz odpowiadającym im intensywności. Wsymulowane widma dobrze odtwarzają widma doświadczalne oprócz zakresu najniższych częstości, dla którego istotne mogą być ruchy dużych fragmentów białka.

Wyniki uzyskane dla C23O mogą stanowić punkt wyjścia dla poszukiwań efektywniejszych biokatalizatorów rozkładających chlorowcowe pochodne związków aromatycznych; pozytywne wyniki symulacji widm NRVS dla modeli NHI będą podstawą dla dalszych badań nad szeregiem mutantów punktowych centrum fotosyntetycznego.



## **Nanostruktury materii miękkiej**



## 12. Topologia i właściwości elektrokinetyczne monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe.

### Określenie konformacji fibrynogenu na podstawie pomiarów adsorpcji mikrocząstek koloidalnych

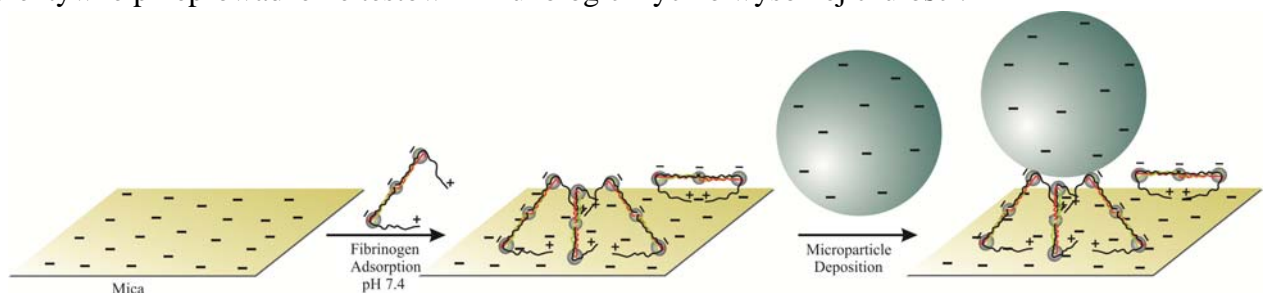
(prof. Zbigniew Adamczyk, dr hab. Jakub Barbasz, dr Małgorzata Nattich-Rak, mgr Marta Sadowska, dr Monika Wasilewska)

Głównym celem przeprowadzonych badań było rozwinięcie efektywnej metody detekcji monowarstw białkowych na powierzchniach ciało stałe/elektrolit, w warunkach *in situ* (Rys. 1). 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 ludzkiego na powierzchni miki tworzonych w warunkach transportu dyfuzyjnego przy pH 3.5 oraz 7.4 dla szerokiego zakresu sił jonowych. Stężenie powierzchniowe fibrynogeny (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. Właściwości elektrokinetyczne monowarstw oraz ich stabilność były określane przy użyciu metody potencjału przepływu. Wykazano, że dla pH 3.5 fibrynogen adsorbuje się nieodwracalnie dla zakresu siły jonowej od  $4 \times 10^{-4}$  do 0.15 M. Dla pH 7.4 zaobserwowano częściową desorpcję cząsteczek fibrynogeny w orientacji prostopadłej dla siły jonowej poniżej  $10^{-2}$  M, natomiast cząsteczki w orientacji równoległej nie ulegają desorpcji. Te różne orientacje cząsteczek oraz strukturę monowarstw fibrynogeny określano przy użyciu powyższej metod CE używając mikrosfer polistyrenowych, charakteryzujących się ujemnym ładunkiem powierzchniowym. Zaobserwowano anomalne zjawisko osadzania cząstek lateksu na powierzchniach charakteryzujących się również wypadkowym ładunkiem ujemnym, co wyjaśniono przy użyciu modelu opierającego się na heterogenicznym rozkładzie ładunku powierzchniowego. Dla pH 3.5 obserwowano osadzenie lateksu nawet dla niskich sił jonowych, gdy odległość równowagowa cząsteczek wynosiła 70 nm. Natomiast dla pH 7.4 ta krytyczna odległość wynosiła 23 nm. Pomiary te potwierdziły, że monowarstwy fibrynogeny dla tych warunków adsorpcji składają się zarówno z cząsteczek zorientowanych prostopadle, jak też równoległe. Ponadto wykazano, że dodatni ładunek jest zlokalizowany na końcu łańcuchów  $\alpha A$  cząsteczek fibrynogeny.

Pomiary wykazały, 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 praktyczny do wytwarzania monowarstw białek o ściśle zdefiniowanym pokryciu i orientacji cząsteczek, co umożliwia efektywne przeprowadzenie testów immunologicznych o wysokiej czułości.



Rysunek 1. Schemat metody wzmocnienia koloidalnego stosowanej dla określenia orientacji cząsteczek fibrynogeny oraz rozkładu ładunku elektrokinetycznego.

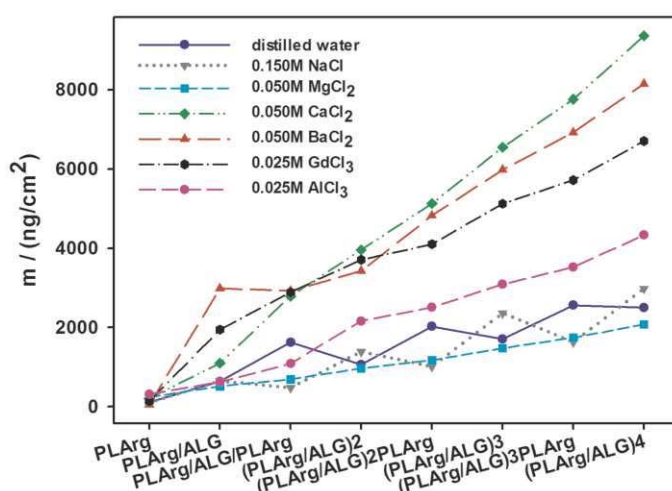
### 13. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

(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 zdeterminowane przez użyte składniki i warunki tworzenia.

Celem zadania realizowanego w roku 2014 było określenie wpływu różnych jonów wielowartościowych 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 CaCl<sub>2</sub>, BaCl<sub>2</sub>, MgCl<sub>2</sub>, AlCl<sub>3</sub>, GdCl<sub>3</sub>. Proces powstawania wielowarstw PLArg/ALG był monitorowany in-situ za pomocą mikrowagi kwarcowej (QCM-D). Masa i grubość wielowarstw były określane przy pomocy modelu Voigta dla filmów wiskoelastycznych. Zaobserwowaliśmy silną zależność masy i grubości powstałych filmów od obecność jonów w roztworze odmywającym, przy czym wzrost masy był wyraźnie większy dla jonów posiadających zdolność do sieciowania alginianu, CaCl<sub>2</sub>, BaCl<sub>2</sub>, AlCl<sub>3</sub>, GdCl<sub>3</sub>. Wzrost ten można tłumaczyć sieciowaniem alginianu oraz zwiększoną adsorpcją wody w usieciowanym filmie. Voltamperometria cykliczna z użyciem wirującej elektrody dyskowej i pary redoksowej 1 mM K<sub>4</sub>Fe(CN)<sub>6</sub> i 1 mM K<sub>3</sub>Fe(CN)<sub>6</sub> w elektrolicie podstawowym 0.15 M NaCl, została wykorzystana do określenia przepuszczalności filmów wielowarstwowych osadzonych na złotej elektrodzie. Zaobserwowaliśmy spadki wartości prądów katodowych i anodowych ze wzrostem liczby osadzonych warstw, w porównaniu z czystą elektrodą. Podobny przebieg zależności przepuszczalności filmów od liczby warstw niezależnie od rodzaju soli użytej do tworzenia filmów na etapie płukania można interpretować poprzez zależność efektywnego współczynnika dyfuzji cząsteczek elektroaktywnych w filmie od grubości filmu.

Nasze wyniki będą miały implikacje dla szybkości uwalniania substancji aktywnych z 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.

## 14. Wpływ rozmiarów powstającego filmu ciekłego i ładunku elektrycznego na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości

(prof. Kazimierz Małyś, dr Jan Zawala, dr Dominik Kosior, dr Marcel Krzan, mgr 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 różnej hydrofobowości. Kolizje pęcherzyków z powierzchniami ciał stałych (ziarnami w procesie flotacji) są dynamicznymi procesami zachodzącymi w czasach milisekundowych. Jeżeli w czasie trwania kolizji nastąpi przerwanie filmu ciekłego oddzielającego powierzchnię pęcherzyka od powierzchni ciała stałego to powstaje kontakt trójfazowy ciecz/gaz/ciało stałe. Aby nastąpiło przerwanie filmu ciekłego to film powstający i zmniejszający swoją grubość w trakcie kolizji musi lokalnie osiągnąć grubość krytyczną pęknięcia w czasie kolizji. Prędkość wyciekania filmów ciekłych jest odwrotnie proporcjonalna do rozmiarów filmu, a rozmiar filmów powstających w trakcie kolizji zależy nie tylko od rozmiarów pęcherzyków, ale także od ich prędkości w momencie zderzenia. Stabilność cienkich filmów ciekłych powstających pomiędzy pęcherzykiem powietrza i powierzchnią ciała stałego jest determinowana głównie poprzez hydrofilowo/hydrofobowe właściwości i szorstkość powierzchni ciał stałych, rodzaj i wielkość oddziaływań w cienkich filmach ciekłych, np. elektrostatyczne pomiędzy podwójnymi warstwami elektrycznymi powierzchni międzyfazowych filmów i siły van der Waalsa (teoria DLVO).

Wykonano pomiary kinetyki powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) na hydrofilowych powierzchniach szkła i miki, których kąty zwilżania  $\theta_{adv} < 4^\circ$ , oraz hydrofobowych powierzchniach silanowanego szkła, Teflonu o różnej szorstkości powierzchniowej, oraz polichlorku winylu PCV, dla których kąty zwilżania  $\theta_{adv}$  były powyżej  $100^\circ$ . Wielkość oddziaływań elektrostatycznych w cienkich filmach ciekłych powstających w trakcie kolizji pęcherzyków z badanymi powierzchniami ciał stałych modyfikowano poprzez zmianę pH i siły jonowej roztworów oraz preferencyjną adsorpcję surfaktanta kationowego na powierzchni pęcherzyków. Na hydrofilowych powierzchniach szkła i miki filmy zwilżające nie powstawał kontakt trójfazowy (TPC) ponieważ filmy ciekłe (zwilżające) powstające w trakcie kolizji nie ulegały przerwaniu. Te filmy zwilżające były stabilizowane odpychającymi oddziaływaniami elektrostatycznymi występującymi pomiędzy ujemnie naładowanymi powierzchniami pęcherzyka i ciał stałych. W roztworach bromków n-alkilotrójmetyloamoniowych powstawał TPC, ponieważ następowała zmiana ładunku elektrycznego na powierzchni pęcherzyków wskutek preferencyjnej adsorpcji cząsteczek kationowego surfaktanta i następowała destabilizacja filmów zwilżających poprzez występujące wtedy przyciągające oddziaływania elektrostatyczne. W przypadku powierzchni o wysokiej hydrofobowości (Teflon, silanizowane szkło, PCV) zawsze następowało powstawanie kontaktu trójfazowego, a zmiana pH i siły jonowej praktycznie nie wpływała na kinetykę powstawania TPC, co pokazuje brak wpływu oddziaływań elektrostatycznych na stabilność tych filmów. Destabilizacja filmów ciekłych na powierzchniach stałych o wysokiej hydrofobowości odpowiada mechanizm nukleacyjny, a na kinetykę powstawania TPC ma istotny wpływ obecność powietrza (nano- i mikropęcherzyki) na tych powierzchniach.

Wyniki tych badań mogą mieć zastosowanie do optymalizacji procesów rozdzielania flotacyjnego, którego efektywność jest determinowana kinetyką zajścia tzw. elementarnego aktu flotacyjnego, czyli kinetyką powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) i przyczepienia ziaren mineralnych do pęcherzyków gazu.



## 15. Modelowanie molekularne oraz przewidywanie właściwości wybranych układów o potencjalnym znaczeniu biomedycznym

(*dr hab. Tomasz Pańczyk, prof. IkiFP, dr hab. Wojciech Plaziński, dr Agnieszka Brzyska*)

Nanorurki węglowe stanowią obiekt intensywnych badań jako układy nośników leków. Ich igłowa struktura zapewnia łatwe przenikanie przez ściany komórkowe a nawet dotarcie do jądra komórki. Trudności w stosowaniu biomedycznym nanorurek dotyczą ich słabej rozpuszczalności w wodzie oraz tendencji do aglomeracji. Rozwiązaniem tych problemów może być wytworzenie hydrofilowego płaszcza na powierzchni nanorurek. Tego rodzaju modyfikacja może być zrealizowana poprzez funkcjonalizację kowalencyjną ścianek bocznych nanorurek lub poprzez adsorpcję odpowiednich molekuł. Drugi cel badawczy dotyczył stereoselektywności oddziaływań lek-receptor. Jest to jeden z kluczowych aspektów w procedurach projektowania nowych leków. Celem badań było opracowanie szybkiej metody obliczeniowej, która pozwoliłaby zidentyfikować preferencyjną stereokonfigurację wszystkich centrów chiralnych w cząsteczce leku. Trzeci cel badawczy to analiza przegrupowań tautomerycznych w cząsteczkach biomolekuł. Teoretyczny opis równowagi tautomerycznej oraz zbadanie wpływu obecności medium na stan równowagi i względnej stabilności poszczególnych form tautomerycznych analizowanych substancji może być kluczowe w wyjaśnianiu ich terapeutycznych właściwości.

W ramach badań przeanalizowano dwa podejścia mające na celu poprawę właściwości hydrofilowych nanorurek węglowych. Pierwszym z nich było zastosowanie modyfikatora kowalencyjnego natomiast drugim adsorpcja (modyfikator niekowalencyjny) małych cząsteczek koloidalnych. Modyfikacja kowalencyjna polegała na przyłączeniu polarnych grup amidowych do ścianek bocznych nanorurek. Natomiast jako modyfikator niekowalencyjny wybrano adsorpcję ujemnie naładowanych cząstek koloidalnych zbudowanych z pochodnej anionowej chitosanu o średnicach 16 Å i 32 Å. W ramach drugiego tematu zaproponowano modyfikację potencjałów klasycznych pól siłowych, które opisują stereokonfigurację centrum chiralnego liganda. Zmieniony potencjał jest w stanie jednocześnie opisać dwie przeciwstawne konfiguracje, oddzielone od siebie (niefizyczną) wysoką barierą energetyczną. Natomiast badania protropowego przegrupowania w obrębie cząsteczek antybiotyków nukleozydowych obejmowały teoretyczne wyznaczenie wartości entalpii, entropii i bariery energetycznej tautomeryzacji. Przeanalizowano również wpływ obecności rozpuszczalnika na względną stabilność badanych form. W przypadku rozpatrywanych układów przejście tautomeryczne związane jest z tworzeniem się wiązań wodorowych między atomem wodoru a atomami azotu w pierścieniu aglikonowym. Przeprowadzono też obliczenia parametrów widm NMR  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  oraz  $^{14}\text{N}$ .

Wyniki obliczeń dotyczące modyfikacji ścianek bocznych nanorurek wskazują na istotne polepszenie parametrów energetycznych układów po zastosowaniu modyfikatorów. Jednakże, energia adsorpcji małych cząstek koloidalnych zarówno na ściankach jedno- jak i wielościennych nanorurek węglowych jest zbyt niska, aby układ był stabilny w temperaturach rzędu 300-310K. Modyfikacja kowalencyjna prowadzi o uzyskania układów o dobrych parametrach energetycznych. Uzyskano zgodny z danymi eksperymentalnymi opis oddziaływań lek-białko dla układu fenoterol-receptor b2-adrenergiczny, wg. którego siła wiązania liganda zmienia się zgodnie z kolejnością stereokonfiguracji: (R,R) > (R,S) > (S,R) > (S,S). Wyznaczono teoretyczne udziały poszczególnych struktur tautomerycznych w stanie równowagi termodynamicznej. W przypadku obu nukleozydów znaczący wydaje się być wpływ polarnego rozpuszczalnika na stan równowagi tautomerycznej.

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 uproszczenie metod ich syntezy.

## **Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**



## 16. Opracowanie modelu osadzania pyłów we wnętrzach budynków zabytkowych

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

Celem badań jest opracowanie ogólnego modelu przenoszenia i osiadania cząstek pyłu zawieszonego we wnętrzach budowli zabytkowych, oraz poprawa, na podstawie wyników modelowania, metodyki ograniczającej brudzenie zabytkowych powierzchni, wyposażenia i zbiorów przy różnych rodzajach użytkowania budynków.

Model ten powstaje w oparciu o monitorowanie stężenia pyłów i obliczanie głównych parametrów przenoszenia i osiadania, oraz symulacje numeryczne ruchów fizycznych i osiadania cząstek. Modelowanie składa się z dwóch części: pomiaru stężenia cząstek o różnych rozmiarach w zabytkowym budynku będącym przedmiotem diagnozy oraz wyodrębnienia zaniku stężenia cząstek w trakcie penetracji i w wyniku osiadania (odpowiednio  $K$  i  $P$ ) przy użyciu chwilowego, dwuparametrowego modelu do analizy danych, w którym współczynnik osiadania  $K$  – strumień zawieszonych w powietrzu cząstek osiadających na ścianach, posadzce i innych powierzchniach – wyprowadza się z równania zachowania masy odnoszącego się do stężenia cząstek na zewnątrz i we wnętrzu (odpowiednio  $C_{out}$  i  $C_{in}$ ):

$$V \cdot dC_{in}/dt = AER \cdot P \cdot V \cdot C_{out} - AER \cdot V \cdot C_{in} - K \cdot V \cdot C_{in} + S$$

gdzie  $V$  jest objętością wnętrza,  $t$  czasem,  $AER$  współczynnikiem wymiany powietrza,  $P$  współczynnikiem penetracji, a  $S$  szybkością emisji pyłu ze źródeł wewnętrznych.  $AER$  określa się z dopasowania funkcji eksponentialnej do krzywej zaniku stężenia  $CO_2$  wprowadzonego przez oddechy ludzi przebywających wcześniej w budynku.  $S$  wynosi zero, gdy analizę prowadzi się dla okresów z zanedbywalną emisją ze źródeł wewnętrznych. Monitorowanie prowadzone w budynkach zabytkowych pokazało, że znaczna emisja pyłów ze źródeł wewnętrznych wiąże się z działaniami ludzi, na których obecność w danych z monitorowania wskazuje zwiększone stężenie  $CO_2$ . W ten sposób okresy te można łatwo wykryć i usunąć z profili czasowych  $C_{in}$ .

Opracowaną metodę zastosowano do analizy wieloletnich pomiarów stężenia cząstek w kilku zabytkowych kościołach, obejmujących zależności pomiędzy stężeniami wewnątrz i na zewnątrz. Najmniejsze wartości  $AER$  wynoszące między  $0,1$  i  $0,2 \text{ h}^{-1}$  obserwowano w wielkich kościołach ceglanych w zimie, kiedy naturalna wentylacja jest niewielka ze względu na zamknięte okna i drzwi. Zwykle  $AER$  rośnie, czasem do  $1 \text{ h}^{-1}$ , przy przejściu od okresem chłodnego do ciepłego, czego przyczyną jest otwierania okien i drzwi. Wartości współczynnika osiadania były niewielkie, bliskie  $0,1 \text{ h}^{-1}$  w zimie i  $0,3 \text{ h}^{-1}$  w lecie. Współczynnik penetracji mieścił się w zakresie  $0,8-1,0$ , co było wynikiem spodziewanym ze względu na duże nieuszczelnienia w przegrodach budowlanych zabytkowych kościołów. Analiza dostarczyła szczegółowej informacji o udziale wewnętrznych i zewnętrznych źródeł pyłu w brudzeniu ścian i sklepienia. Udziały te wyliczono jako całki iloczynów stężenia cząstek i współczynnika osiadania po czasie uzyskując liczby cząstek osiadających na jednostkowej powierzchni w danym okresie. Np. analiza danych dla kościoła położonego w gęsto zabudowanym obszarze miejskim pokazała, że cząstki infiltrujące z zewnątrz stanowiły 90% rocznego zabrudzenia powierzchni we wnętrzu, przy czym połowa cząstek osiadła w ciągu czterech miesięcy zimowych z powodu wysokiego stężenia pyłów na zewnątrz.

Opracowany model będzie znacznym osiągnięciem w tej dziedzinie badań, gdyż weźmie pod uwagę fizyczne zachowanie się pyłu zawieszonego w obiektach zabytkowych poddanych rzeczywistym złożonym połączeniom źródeł zanieczyszczeń i cykli klimatycznych. Uzyskane rozwiązania zostaną wykorzystane do opracowanie lepszych strategii prewencji konserwatorskiej w zabytkowych wnętrzach. Po korelacji z wynikami analiz chemicznych i morfologicznych powstanie kompleksowy obraz zachowania cząstek, który wykorzysta się do opracowanie lepszych strategii prewencji konserwatorskiej w zabytkowych wnętrzach.



## **PROJEKTY BADAWCZE MNiSW**



# 1. Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego

Projekt badawczy MNiSW N N204 205240 [2011-2014]

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

Celem badań było określenie stabilności układu nanopojemników molekularnych w środowisku o parametrach płynu fizjologicznego (roztwór  $0.145 \text{ mol L}^{-1}$  NaCl w wodzie). Ze względu na znaczną hydrofobowość nanorurek węglowych takie parametry jak zakres oddziaływań dyspersyjnych, stabilność stanu zamkniętego w przypadku zderzeń międzycząsteczkowych oraz efektywność magnetycznie wyzwalanego otwierania nanopojemników mają kluczowe znaczenie dla funkcji układu jako potencjalnego nośnika leków.

Przeprowadzono, obliczenia oparte na wykorzystaniu modelu i pola siłowego opracowanego w ramach wcześniejszych zadań badawczych, pozwalające na badanie tych zjawisk przy użyciu dynamiki molekularnej. W szczególności obliczenia dotyczyły: wartości energii oddziaływań międzycząsteczkowych w układach dwóch nanopojemników molekularnych w różnych konfiguracjach przestrzennych oraz stabilności stanu zamkniętego nanopojemnika w zależności od wzajemnej orientacji przestrzennej układu nanopojemników. Badaniom poddano również procesy kolizji dwóch nanopojemników, zawierających we wnętrzu molekule cisplatyny, w roztworze wodnym. 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. Procesy magnetycznie wyzwalanego otwierania nanopojemników były również przedmiotem analizy ze względu na znaczne prawdopodobieństwo blokowania stanów zamkniętych i otwartych przez wzajemne oddziaływania międzycząsteczkowe.

Przeprowadzone badania pozwalają na stwierdzenie, że: w warunkach fizjologicznych (tj. w temperaturach rzędu 310 K) zderzenia nanopojemników nie prowadzą do destabilizacji stanów zamkniętych i niekontrolowanego przeciekania cząsteczek zamkniętych w wnętrzach nanopojemników. Natomiast zderzenia odpowiadające temperaturom kolizji rzędu 400-600 K wywołują chwilowe destabilizacje stanów zamkniętych, którym może towarzyszyć zjawisko uwalniania cząsteczek-gości z wnętrza nanorurek. Należy podkreślić, że te zjawiska zachodzą w warunkach dalekich od przewidywanych warunków pracy nanopojemników. Analiza zakresu oddziaływań dyspersyjnych pomiędzy nanopojemnikami prowadzi do wniosku, że aktualny stan chemiczny nanopojemnika, tj. hydrofobowe ścianki nanorurek i hydrofilowe czoła nie zapewniają stabilności koloidalnej w roztworze. Istnieje wysokie prawdopodobieństwo aglomeracji nanopojemników w duży klaster i w konsekwencji sedymentacji z roztworu. Zatem, analizowana obecnie architektura nanopojemnika nie może być bezpośrednio zastosowana jako nośnik leków. Potrzebne są dalsze modyfikacje prowadzące do zredukowania oddziaływań hydrofobowych i zwiększenia hydrofilowości układu. Stwierdzono, że magnetycznie indukowane procesy otwierania nie są zaburzone przez oddziaływania międzycząsteczkowe. Natomiast, 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 'wyrwania' cząsteczek leku przez nanocząstki magnetyczne. Obserwuje się wówczas obszar pozornej dyfuzji nieaktywowanej. Uzyskane wyniki potwierdzają potencjalną użyteczność rozważanego układu w dziedzinie nanomedycyny jako nośnika leków o zdolności do wyzwalania procesu uwalniania leku pod wpływem oddziaływania z zewnętrznym polem magnetycznym. Potrzebne są jednakże dalsze badania nad zwiększeniem hydrofilowości układu oraz zredukowaniem prawdopodobieństwa aglomeracji.



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

Projekt badawczy MNiSW N N2014133640 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem projektu było zbadanie wpływu obecności sub-mikronowych pęcherzyków powietrza na powierzchniach ciała stałego o zdefiniowanej szorstkości na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) ciecz/gaz/ciało stałe przez uderzający pęcherzyk gazowy. W okresie sprawozdawczym badano kinetykę powstawania TPC podczas zderzeń pęcherzyka hydrofobizowanymi powierzchniami porowatych spieków szklanych o zdefiniowanej średnicy porów (16-40  $\mu\text{m}$ ). Ruch pęcherzyka o promieniu  $R_b = 0.74$  mm oraz kinetyka jego zderzeń z powierzchnią porowatą monitorowane były przy użyciu szybkiej kamery cyfrowej o częstotliwości 1000 Hz. 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 ( $\sim 20$  cm/s). W celu uzyskania efektu różnej ilości powietrza obecnego na powierzchniach porowatych, opracowano 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. Usunięcie powietrza z powierzchni ciała stałego (przypadek "no-air") powodowało, iż do całkowitego rozproszenia energii kinetycznej związanej z ruchem pęcherzyka dochodziło znacznie później w porównaniu do przypadku "air". Obserwowano także charakterystyczne przesunięcie zależności zmian położenia oraz prędkości pęcherzyków w czasie, w kierunku czasów krótszych, w przypadku "air". W przypadku "no-air" utworzenia kontaktu trójfazowego następowało podczas drugiego zderzenia, podczas gdy dla powierzchni „air” podczas pierwszego, tj.  $t_{\text{TPC}}$  ulegał skróceniu z około 22 do około 2 ms. 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  $\mu\text{m}$ . 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 mikropęcherzyk wystający z porów powierzchniowych. Powoduje to znaczne skrócenia czasu potrzebnego do utworzenia stabilnego TPC.

### 3. 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 projektu było szczegółowe zbadanie mechanizmu wymiany jonu  $Mg^{2+}$  w porfirynie i jej wybranych pochodnych, jako modeli chlorofilu a, na jon innego metalu dwuwartościowego ( $Cu^{2+}$ ,  $Zn^{2+}$ ) w obecności jonów octanowych oraz określenie parametrów wpływających na sposób i szybkość zachodzenia tego procesu.

Badania prowadzone w ramach projektu wykonywano kwantowo-chemiczną metodą DFT (Teoria Funkcjonałów Gęstości) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z zastosowaniem przybliżenia RI, zaimplementowanego w programie Turbomole. Badane układy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań, kąty walencyjne), elektronowych (ładunki) oraz zmian energii towarzyszących poszczególnym etapom badanych reakcji. Wyniki uzyskane metodami teoretycznymi poparto badaniami spektroskopowymi oraz kinetycznymi w roztworach.

Określono możliwe formy koordynacyjne różnych modeli chlorofilu a oraz jonów  $Cu^{2+}$  i  $Zn^{2+}$  obecne w wybranych rozpuszczalnikach organicznych (ACN, DMSO, pirydyna, octan etylu, DMF, aceton, metanol), które stanowią stany wyjściowe dla badanej reakcji.

Zbadano mechanizm wymiany magnezu w porfirynie oraz jej pochodnych, będących modelami chlorofilu a na jon metalu dwuwartościowego ( $Cu^{2+}$  i  $Zn^{2+}$ ). Na podstawie przeprowadzonych badań teoretycznych i doświadczalnych postuluje się, że zachodzi on w następujących etapach:

1. Wymiana jednego liganda ACN w kompleksie magnezowym na jon octanowy. Jon octanowy powoduje znaczne wysunięcie jonu  $Mg^{2+}$  ponad płaszczyznę porfiryny. Równocześnie drugi ligand aksjalny (ACN) ulega dysocjacji.
2. Deformacja pierścienia porfiryнового i asocjacja jonu miedzi/cynku poprzez wiązanie z jednym z azotów z pierścienia. Jon miedzi, który w roztworze jest koordynowany przez cztery cząsteczki rozpuszczalnika, ulega stopniowej desolvatacji. Zwolnienie pozycji koordynacyjnej umożliwia oddziaływanie z atomem azotu z porfiryny.
3. Utworzenie tzw. kompleksu "sittingatop", w którym oba jony metalu tworzą wiązanie z ligandem porfiryновym. Przeprowadzone badania teoretyczne wskazują, że stabilizacja kompleksu "sittingatop", jest wspomagana obecnością jonów octanowych w roztworze, które koordynują nie tylko jon  $Mg^{2+}$ , lecz również jon drugiego metalu.
4. Oddysocjowanie jonu magnezu, schelatowanego przez jon octanowy, "wejście" jonu miedzi lub cynku do pierścienia porfiryнового.

Kluczowym dla zajścia procesu transmetalacji jest dodatek liganda chelatującego, zazwyczaj octanu, do mieszaniny reakcyjnej. Zbadano możliwość użycia innych związków aktywujących proces transmetalacji i wytypowano jon acac- jako aktywujący porfirynę silniej niż octan. Stwierdzono równocześnie, że ligand chelatujący ma dwojaki wpływ na zmiany zachodzące w badanych układach tetrapirołowych:

- geometryczny, polegający na wygięciu pierścienia tetrapirołowego, wysunięciu Mg ponad płaszczyznę, co ułatwia nadchodzącemu jonowi miedzi/cynku wiązanie z azotem tetrapirołu, czego miarą jest wysunięcie jonu Mg "out-of-plane". Silniejszy wpływ ma tu acac-, słabszy octan.
- elektronowy, polegający na zwiększeniu nukleofilowości pirolowych atomów azotu. Powoduje to ułatwienie ataku jonów  $Cu^{2+}$  na pierścień tetrapirołowy. Preferencje badanych ligandów są tu odwrotne, silniejszy wpływ obserwowany jest dla mniejszego ligandu octanowego, mniejszy dla większego acacu<sup>-</sup>.

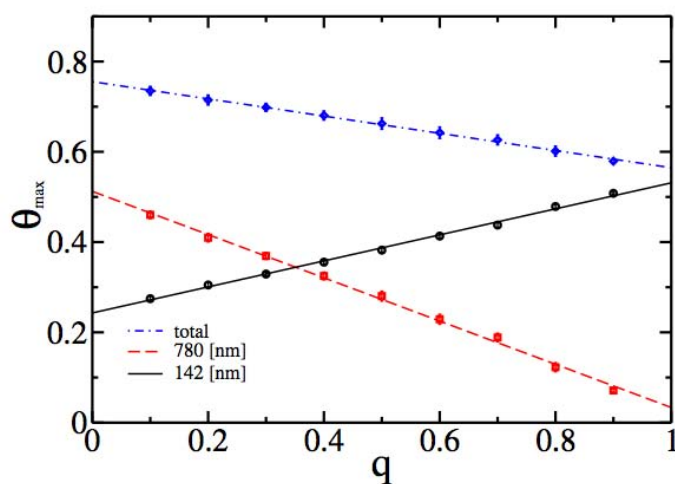
#### 4. Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności

Projekt badawczy MNiSW N N204 439040 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr hab. Jakub Barbasz)

Projekt został zakończony zgodnie z planem. Wykonano wszystkie przewidziane harmonogramem zadania a uzyskane wyniki zostały opublikowane w czasopiśmie z listy filadelfijskiej.

Określono maksymalne pokrycia cząstkami koloidalnymi o dwóch różnych rozmiarach osadzonymi równoległe od ich wzajemnego stosunku ilościowego, co zostało przedstawione na wykresie poniżej. Określono również pokrycie maksymalne w zależności od stosunku średnic poszczególnych cząstek. Równocześnie określono parametry prowadzenia procesu osadzania prowadzące do uzyskania zamierzonej struktury. Przeprowadzono prace teoretyczne oraz doświadczalne potwierdzające uzyskane numerycznie rezultaty.



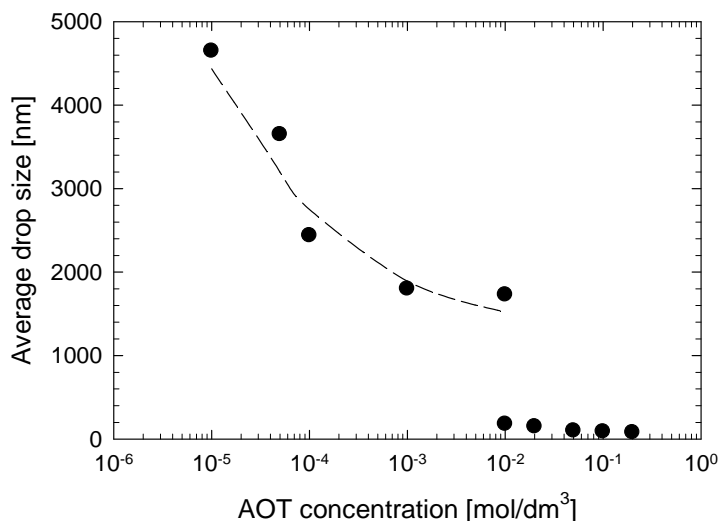
## 5. Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek

Projekt badawczy MNiSW N N209 757340 [2011-2014]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu było opracowanie podstaw naukowych efektywnej metody otrzymywania stabilnych kropli emulsji o kontrolowanych rozmiarach metodą emulsyfikacji membranowej, które mogą zostać 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 i może znaleźć zastosowanie w produkcji kapsulek na skalę przemysłową.

W 2014 zakończono projekt. Wykorzystano zbudowany w ramach tego projektu w naszym Instytucie zestaw do emulsyfikacji membranowej do enkapsulacji w powłokach polielektrolitowych skwalenu jako fazy olejowej. Opracowano metodę formowania kapsulek polielektrolitych z rdzeniem emulsyjnym zawierających substancję czynną wykorzystując technikę membranową. Zbadano wpływ stężenia środka powierzchniowo czynnego na rozkład wielkości kropli emulsyjnych wytworzonych przez emulsyfikator membranowy. Zaobserwowano dwa reżimy tworzenia emulsji (patrz Rysunek 1), dla stężeniu poniżej  $1 \times 10^{-2} \text{ M}$  AOT obserwowano klasyczną emulsyfikacji membranową, a średnia wielkość kropli emulsji zgadzała się z przewidywaniami teoretycznymi, powyżej tego stężenia dominował proces emulsyfikacji samoczynnej. Utworzone nanoemulsje enkapsulowano w powłokach polielektrolitowych utworzonych z polielektrolitów PAH i PSS. Aby zademonstrować możliwość enkapsulacji hydrofobowych czynników aktywnych, modelowy lek naproksen został zamknięty w nanonośnikach (rozmiar  $\sim 120 \text{ nm}$ ).



Rysunek 1. Wykres zależności wielkości kropli emulsji od stężenia surfaktantu AOT

Efektem realizacji projektu było zgromadzenie podstawowej wiedzy na temat metody otrzymywania stabilnych kropli emulsji o kontrolowanych rozmiarach metodą emulsyfikacji membranowej. Emulsje te mogą być wykorzystane jako rdzenie do wytworzenia mikrokapsulek i nanokapsulek. Otrzymane wyniki mają duże znaczenie poznawcze oraz wnoszą istotny wkład w zakresie wykorzystania technik membranowych w procesach enkapsulacji.



## **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)

Nośniki leków, których podstawowym elementem struktury są nanorurki węglowe, stanowią obiekt intensywnych prac badawczych ze względu na użyteczne właściwości fizykochemiczne i mechaniczne nanorurek. Potwierdzone zostało silne wzmocnienie aktywności farmakologicznej niektórych leków antynowotworowych po przyłączeniu ich do ścianek nanorurek węglowych. Inną koncepcją jest wykorzystanie nanorurek jako transporterów cząsteczek leku zamkniętego w ich wnętrzu czy też stworzenie układu, który pozwalałby na kontrolowany transport i jednocześnie pozwalał na obrazowanie jego dystrybucji w organizmie. Dlatego celem tego etapu badań było modelowanie układów zawierających nanorurki węglowe oraz czynnik dodatkowy czuły na parametr środowiska i pozwalający na kontrolę struktury molekularnej układu. Skupiono się na wykorzystaniu cząsteczek barwnika (czerwień Kongo) oraz nanocząstek magnetycznych. Pierwszy z nich pozwala na kontrolę struktury molekularnej układu poprzez zmiany pH roztworu, drugi zaś wykorzystuje czynnik zewnętrzny, jakim jest pole magnetyczne.

Zbadano jak struktura molekularna układu nanorurka – czerwień Kongo zmienia się w zależności od pH roztworu. Przeprowadzono szereg obliczeń dla nanorurek o różnej średnicy i różnej gęstości czerwieni Kongo zaadsorbowanej na powierzchni nanorurek. Innym aspektem badań było opracowanie metodologii wyznaczania czasu relaksacji  $T_2$  w układach zawierających nanocząstki magnetyczne metodą dynamiki molekularnej.

Wyniki przeprowadzonych obliczeń wskazują, że zastosowanie cząsteczek barwników, których rozkład ładunku zmienia się w okolicy  $\text{pH} = 5-7$  może być wykorzystany do kontrolowanego uwalniania leków z wnętrza nanorurek węglowych. Przy wyższych wartościach pH odpowiadających zdeprotonowanej formie czerwieni Kongo, zachodzi spontaniczna absorpcja barwnika we wnętrzu nanorurek. Zmniejszenie pH poniżej  $\text{pK}_a$  prowadzi natomiast do opróżnienia nanorurki i lokalizacji barwnika na powierzchni. Efekt ten może być wykorzystany do kontrolowanego uwalniania innych cząsteczek zamkniętych we wnętrzu nanorurki przez odpowiednio zaplanowaną sekwencję zmian pH i wprowadzania cząsteczek leku i barwnika do nanorurek węglowych. Badania czasu relaksacji  $T_2$  potwierdziły wysoką skuteczność nanocząstek magnetycznych o rozmiarach rzędu  $100 \text{ \AA}$  jako czynników kontrastowych w obrazowaniu MRI. Dzięki tym badaniom opracowano oryginalną i nie publikowaną dotychczas metodykę wyznaczania czasów relaksacji  $T_2$  metodą pełnej dynamiki molekularnej. Dzięki temu możliwe jest badanie wpływu różnych czynników (zwykle zaniebawianych w innych metodach teoretycznych) na czasy relaksacji, tj. adsorpcji wody na powierzchni nanocząstek magnetycznych, oddziaływań dyspersyjnych pomiędzy cząstkami magnetycznymi, natężenia zewnętrznego pola magnetycznego oraz efektów wynikających z aglomeracji nanocząstek magnetycznych w większe klasterki. Dzięki przeprowadzonym badaniom wykazano, że tzw. „relaxivity” osiąga maksimum przy pewnej określonej wielkości klastera ok.  $300-350 \text{ \AA}$ .

Uzyskane wyniki mogą być wykorzystane w projektowaniu nośników leków, w których czynnikiem wyzwalającym uwalnianie leku jest zmiana pH z fizjologicznego  $\sim 7$  do kwaśnego  $\sim 5$  co zachodzi w lizosomach lub tkance nowotworowej. Uzyskane wnioski, co do wpływu różnych czynników na czasy relaksacji  $T_2$  mają znaczenie poznawcze i mogą służyć jako potwierdzenie teoretyczne różnych założeń upraszczających stosowanych dotychczas w analizie czasów relaksacji spin-pole w obecności cząstek magnetycznych.





## **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)

Zgodnie z założeniami projektu zakończono prowadzone przez okres co najmniej jednego roku monitorowanie warunków środowiskowych oraz stężenia pyłu zawieszonego wewnątrz i na zewnątrz łącznie w siedmiu kościołach, a w dodatkowych trzech kościołach pomiary te są nadal prowadzone. Zestawienie przebadanych kościołów wraz z rodzajem ogrzewania w nich stosowanego znajduje się w Tabeli 1.

Tabela 1. Monitorowane kościoły oraz systemy grzewcze w nich zainstalowane

ogrzewanie kościół	podłogowe	ławkowe	ciepłe powietrze	promienniki	centralne
Duży (murowany)	Bazylika Katedralna NNMP w Tarnowie	Kościół św. Józefa w Krakowie-Podgórzu	Bazylika p.w. Wniebowzięcia NMP i św. Wacława w Krakowie-Mogile	Kościół św. Katarzyny Aleksandryjskiej w Krakowie	Bazylika Mariacka w Krakowie
			Bazylika kolegiacka NNMP w Wiślicy		
Mały (drewniany /murowany)	Kościół św. Ducha w Żabnie	Kościół p.w. św. Bartłomieja w Krakowie-Mogile		Cerkiew p.w. św. Proroka Eliasza w Podbielu	Cerkiew metropolitalna św. Marii Magdaleny w Warszawie

Zgromadzone do tej pory obszerne, statystycznie reprezentatywne zbiory danych umożliwiły określenie:

- szybkości wymiany powietrza między przestrzenią zewnętrzną i wnętrzem,
- infiltracji pyłu zawieszonego związanej z wymianą powietrza,
- wewnętrznych źródeł zapylenia oraz ich udziału w całkowitym stężeniu pyłu zawieszonego,
- szybkości osiadania cząstek na powierzchniach architektonicznych i wyposażenia, będącego źródłem zabrudzenia i korozji,
- efektu podnoszenia osadzonego pyłu w wyniku użytkowania kościoła.

Omawiane parametry wyznaczono dla dwóch okresów klimatycznych – zimy i lata, między którymi występują różnice w wentylacji kościołów i warunkach klimatycznych w nich panujących.

Rozpoczęto dodatkowe, bardzo szczegółowe badania w dwóch dodatkowych kościołach: z ogrzewaniem centralnym w Niegardowie oraz nieogrzewanym kościele w Gryfowie Śląskim. Kościół w Gryfowie Śląskim został wybrany w celu porównania świątyń ogrzewanych z nieogrzewanymi.

W obu kościołach, oprócz rozpoczęcia standardowych pomiarów warunków mikroklimatycznych oraz stężenia pyłu zawieszonego wewnątrz i na zewnątrz, wyeksponowano na ścianach warstwy pobiału wapiennej na podłogach z tkaniny z włókna szklanego, wykonane przez konserwatorów zabytków. Podłóża te, imitujące rzeczywiste powierzchnie zabytkowych tynków, będą zdejmowane w odstępach kwartalnych w celu przeprowadzenia analiz składu chemicznego osadzonych zabrudzeń oraz pomiarów spektrofotometrycznych określających stopień zabrudzenia. Oprócz pobiał wapiennych w badanych kościołach wyłożono w ustawieniu wertykalnym i horyzontalnym dodatkowe podłóża pokryte warstwą lepka, na których będzie możliwe oszacowanie maksymalnej szybkości brudzenia, oraz filtry z teflonu, służące pomiarom grawimetrycznym pyłu osadzonego.

### 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)

Głównym celem naukowym projektu jest funkcjonalizacja filmów polimerowych za pomocą wybranych nanocząstek 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 przeciwnie naładowanych polielektrolitów i/lub nanocząstek bądź liposomów z roztworów. Jako nanocząstki używane są hydrofilowe nanocząstki złota, srebra, oraz 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 kontynuowano określenie wpływu modyfikacji stałych powierzchni modelowych przy użyciu warstw/wielowarstw polielektrolitowych na proces otrzymywania zaadsorbowanej biwarstwy lipidowej zawierającej kropki kwantowe, skupiając się na procesie wprowadzania kropek kwantowych w struktury lipidowe. Metoda samoorganizacji *layer by layer* została wykorzystana do otrzymywania wielowarstwowych filmów polielektrolitowych. Do konstrukcji nanokompozytów użyto zarówno syntetycznych (PEI, PSS, PDADMAC), jak i naturalnych polielektrolitów (PLL, PGA, kwas hialuronowy). Do preparatyki liposomów zastosowano metodę hydratacji cienkiego filmu lipidowego, a w celu ujednoczenia rozmiarów pęcherzyków były one ekstrudowane przez membrany poliwęglanowe o ściśle określonych rozmiarach porów (100nm dla liposomów zawierających wyłącznie lipidy i 200nm dla liposomów lipidowych modyfikowanych kropkami kwantowymi). Kropki kwantowe wbudowywano w hydrofobowe części liposomów. Używano serie kropek kwantowych o rozmiarach od 1.6nm do ok. 6nm. Każdy rodzaj kropek kwantowych udało się wbudować w badane układy lipidowe. Zostało to udowodnione poprzez rejestrację widm emisji, przy użyciu spektrofluorymetru, dla liposomów z kropkami kwantowymi. Obserwowano charakterystyczne piki, odpowiadające zastosowanym kropkom kwantowym. Rutynowo badano rozmiary i potencjał zeta wytwarzanych 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 przede wszystkim określenie struktury form lipidowych tworzących się na powierzchniach zmodyfikowanych – czy zaadsorbowały się w postaci liposomów, czy też nastąpiła fuzja liposomów skutkująca utworzeniem się biwarstwy). Stwierdzono, że na powierzchniową fuzję liposomów wpływa zarówno rodzaj pęcherzyków lipidowych, obecność kropek kwantowych wewnątrz struktury biwarstwy (w obrębie łańcuchów hydrofobowych) jak również obecność i rodzaj polielektrolitów użytych do modyfikacji stałego podłoża. Zaobserwowano, iż liposomy zmodyfikowane kropkami kwantowymi są mniej stabilne niż liposomy zbudowane wyłącznie z lipidów. Zaadsorbowaną biwarstwę lipidową (również z kropkami kwantowymi) otrzymano tylko dla ujemnie naładowanych liposomów osadzonych na sensorze krzemowym z elektrodą złotą pokrytą polietylenoiminą. Zdjęcia AFM potwierdziły badania prowadzone przy użyciu QCM.

#### 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)

##### Konformacja pierścieni piranozowych: modelowanie metodą *transition path sampling*

Celem badań było szczegółowe zbadanie dynamiki oraz termodynamiki przejść konformacyjnych (typu krzesło  ${}^1C_4 \leftrightarrow$  krzesło  ${}^4C_1$ ) w cząsteczkach wybranych cukrów, zbudowanych z sześcioczłonowych 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 policukrów.

Zbadano zagadnienie wpływu zmian geometrii pierścienia na konformację wiązań glikozydowych łączących poszczególne jednostki cukrowe w łańcuchu poli- lub oligocukrów. Wzięto pod uwagę wszystkie możliwe pentametry zbudowane z niepodstawionych jednostek heksopiranozowych tego samego typu i połączonych wiązaniami 1,4-glikozydowymi. Obliczono trójwymiarowe powierzchnie energii swobodnej dla współrzędnych zdefiniowanych przez wartości torsyjnych kątów glikozydowych ( $\phi$  i  $\psi$ ) oraz parametru opisującego kształt pierścienia ( $\theta$  Cremera-Pople'a).

Wyniki wskazują, że deformacje pierścieni mają raczej ograniczony wpływ na geometrię wiązań glikozydowych; maksymalne przesunięcia w wartościach średnich kątów  $\phi$  i  $\psi$  wynoszą ok. 60-70 deg. Z kolei w wielu wypadkach rozkłady prawdopodobieństwa dla wartości  $\phi$  i  $\psi$  pozostają niezmiennie, niezależnie od konformacji pierścienia. Z reguły największe zmiany dotyczą wiązania łączącego pierścień ulegający deformacji z jednostką poprzedzającą go w łańcuchu. Analizując deskryptory wiązania glikozydowego, stwierdzono, że kąt  $\psi$  jest parametrem bardziej wrażliwym na zmieniającą się geometrię pierścienia, co wynika z jego definicji. Najistotniejszym wynikiem jest znalezienie korelacji pomiędzy stopniem odkształcenia wiązań glikozydowych a ich orientacją (aksjalne lub ekwatorialne w odniesieniu do pierścienia pozostającego w konformacji  ${}^4C_1$ ). Z uwagi na znaczne zmiany odległości pomiędzy sąsiednimi jednostkami, wywoływane przez deformacje pierścieni, najbardziej podatne na zmiany w obrębie wiązań glikozydowych są węglowodany z orientacją wiązań jednego typu (wyłącznie aksjalne lub wyłącznie ekwatorialne ułożenie atomów tlenu względem pierścienia).

## 5. Wcelowane dostarczanie leków-synteza i funkcjonalizacja nanonośników

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 mają one 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 czasoprzeźrzną 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 nanonośnikach, 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 dostarczanie", 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 kapsulek w modelu komórkowym. Prace prowadzone są jednocześnie w dwóch ośrodkach posiadających odpowiednie doświadczenie oraz zaplecze sprzętowe niezbędne w tego typu badaniach: w naszym Instytucie oraz na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego.

W 2014 roku skupiono się na preparatyce oraz modyfikacji nanonokapsulek zawierających hydrofobowe leki przeciwnowotworowe dla celowania pasywnego do guzów. Nanokapsułki otrzymano metodą opracowaną w naszym laboratorium tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych. Otrzymano nośniki zawierające leki przeciwnowotworowe o średnim rozmiarze 100 nm, które następnie zmodyfikowano poprzez pegylację. Zsyntezowano pegylowane polielektrolity (PGA-g-PEG) z różnym stopniem wszczępienia oraz z różną długością łańcuchów PEG. Polielektrolity te użyto do utworzenia zewnętrznej pegylowanej warstwy nanokapsulek. Analizę aktywności biologicznej pegylowanych nanokapsulek przeprowadzono stosując różne linie komórek nowotworowych CT26-CEA oraz 4T1. Aktywność enkapsulowanych preparatów badano wykorzystując różne testy biochemiczne (MTT, LDH). Analiza *in vitro* wykazała wysoką aktywność pegylowanych nanokapsulek zawierających lek przeciwnowotworowy. Uzyskane wyniki stanowią podstawę dla kontynuacji badań w celu zastosowania nanonośników w terapiach antynowotworowych.

## 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.

Dla uzyskania materiału biologicznego do badań przeprowadzono hodowlę *S. denitrificans* na pożywce cholesterolowej w dużej skali (100 l) korzystając z zaplecza fermentacyjnego Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu. W wyniku 2 tygodniowej hodowli uzyskano 370 g mokrej masy komórkowej zawierającej aktywność S25DH. Preparatywne oczyszczanie enzymu przeprowadzono 3-etapową metodą opracowaną w poprzednim roku projektu.

Uzyskane frakcje enzymatyczne zostały wykorzystane do badań nad poszerzeniem spektrum substratowego enzymu w szczególności o lepiej rozpuszczalne pochodne cholesterolu. W ramach przygotowań do kinetycznej charakterystyki enzymu przebadano zakres rozpuszczalności natywnych substratów enzymu, tj. cholest-4-en-3-onu i cholest-4,6-dien-3-onu w warunkach opracowanego testu aktywności. Wykazano, że rozpuszczalność obu związków mieści się w granicach 0-0.65 g/l (0-2.5 mM). Granice te wyznaczają zakres dostępny do badań zależności szybkości reakcji enzymatycznej od stężenia substratu. Następnie wykonano pilotażowe próby wyznaczenia parametrów kinetycznych dla dwóch substratów: cholest-4-en-3-onu i cholest-1,4-dien-3-onu stosując saturacyjne 12.5 mM stężenie reutleniacza enzymu ( $K_3[FeCN]_6$ ). Działając w zakresie od 0 do 1.75mM cholest-4-en-3-onu uzyskano liniową zależność szybkości reakcji od stężenia i nie zaobserwowano efektu saturacji enzymu przez substrat. Z tego względu dopasowano liniowe równanie kinetyczne zakładając pierwszorzędową zależność szybkości reakcji względem substratu i pierwszorzędową względem enzymu ( $V=k_{obs}[E_0][S]$ ). Na tej podstawie wyznaczono obserwowaną stałą szybkości reakcji, którą można interpretować jako stosunek stałej szybkości reakcji i stałej Michaelisa-Menten ( $k_{cat}/K_m=927 s^{-1}\cdot mM^{-1}$ ). Z kolei dla cholest-1,4-dien-3-onu uzyskano dane kinetyczne wskazujące na występowanie powolnego procesu saturacji enzymu w zakresie stężeń dostępnym dla testu kinetycznego. Pozwoliło to na dopasowanie modelu Michaelisa-Menten i oszacowanie wartości stałej Michaelisa ( $1.4 \pm 0.2 mM$ ) oraz  $k_{cat}$  i  $k_{cat}/K_m$  ( $2161 s^{-1} mM^{-1}$ ).

W ramach badań teoretycznych przeprowadzono szeroko zakrojone prace nad uzyskaniem modelu podjednostki katalitycznej. W tym celu dokonano selekcji uzyskanych modeli homologicznych w oparciu o dokowanie znanych substratów enzymu. Badania nad dokowaniem substratu do centrum aktywnego dostarczyły informacji na temat oddziaływań poszczególnych reszt aminokwasowych z substratem. Następnie przeprowadzono kwantowo-chemiczną parametryzację centrum molibdenowego i żelazo-siarkowego (typu  $Fe_4S_4(Cys)_3His$ ). Uzyskane parametry wykorzystano do przeprowadzenia szeregu symulacji dynamiki molekularnej (30 ns, 303 K, NPV, 14450 atomów + 30 000 cząsteczek wody) z wykorzystaniem pola siłowego AMBER. Uzyskane struktury kompleksu ES walidowano przeprowadzając referencyjne obliczenia MD i QM:MM dla struktury dehydrogenazy etylobenzenowej. W kolejnym kroku uzyskano wyjściową strukturę modelu QM:MM i przeprowadzono wstępne badania ścieżki reakcji uzyskując struktury kompleksu ES, EP i produktu przejściowego. Ponadto przebadano profil energetyczny reakcji związany z aktywacją wiązania C-H na węglu C-25 oraz z procesem przeniesienia grupy OH.



## 7. Mechanizm i kinetyka koalescencji pęcherzyków powietrza na spokojnych i zaburzanych z kontrolowaną częstotliwością powierzchniach ciecz/gaz

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2013/09/D/ST4/03785 [2013-2017]

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem badań realizowanych w ramach projektu jest określenie mechanizmu decydującego o prawdopodobieństwie odbić pojedynczego pęcherzyka gazowego, zderzającego się z powierzchnią czystej cieczy. Badania skupiają się na elementarnych zjawiskach, które decydują o stabilności ciekłych filmów tworzących się na granicy międzyfazowej ciecz/gaz w warunkach dynamicznych. W celu weryfikacji zakładanych hipotez, w prowadzonych badaniach używany jest unikatowy zestaw eksperymentalny, który umożliwia obserwację dynamicznych zjawisk zachodzących podczas zderzeń pojedynczych pęcherzyków gazowych z powierzchnią ciecz/gaz pozostającą w spoczynku lub też wibrującą z kontrolowanym przyspieszeniem (częstotliwością i amplitudą). 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 obrazy z częstotliwością 1000 klatek na sekundę, (iii) systemu precyzyjnego dozowania gazu (pompa strzykawkowa) oraz (iv) aparatury pozwalająca na indukację kontrolowanych zaburzeń (drgań) powierzchni międzyfazowych, tj. elektromagnetycznego shakera oraz generatora fal i oscyloskopu do kontroli częstotliwości i amplitudy.

W okresie sprawozdawczym skompletowano zestaw eksperymentalny oraz przeprowadzono badania dla powierzchni czystej wody destylowanej. Powierzchni międzyfazowa ciecz/gaz znajdowała się w spoczynku. Pomiary prowadzono w celu określenia takich parametrów, jak: (i) czas koalescencji ( $t_c$ ) tj. czas liczony od momentu pierwszego uderzenia pęcherzyka w powierzchnię międzyfazową do momentu jego pęknięcia oraz (ii) stopień deformacji pęcherzyka podczas zderzeń z badanymi powierzchniami międzyfazowymi. Pęcherzyki powietrza wytwarzane były w kontrolowany sposób na kapilarach szklanych o różnej średnicy wewnętrznej (ID). Generacja pęcherzyków odbywała się za pomocą precyzyjnego układu dozowania gazu, który pozwalał na kontrolę częstotliwości odrywania się pęcherzyków. Pozwalało to obserwować ruch i uderzenie w powierzchnię międzyfazową pojedynczego pęcherzyka. Dzięki zastosowaniu różnych rozmiarów kapilar (ID. 0.050, 0.064, 0.075 oraz 0.10 mm) średnica utworzonych pęcherzyków oscylowała w przedziale 1.00-1.66 mm. Wykazano, że prędkość graniczna pęcherzyka, będąca jednocześnie jego prędkością uderzenia w powierzchnię międzyfazową rosła wraz ze wzrostem wielkości pęcherzyka. Ponadto, również czas koalescencji był proporcjonalny do wielkości pęcherzyka – rósł wraz ze wzrostem jego średnicy. Np. dla pęcherzyka o średnicy 1.0 mm, uderzającego w powierzchnię ciecz/gaz z prędkością 26 cm/s,  $t_c$  wynosił 22 ms, natomiast dla pęcherzyka o średnicy 1.66 mm i prędkości 36.7 cm/s,  $t_c$  wydłużył się do 110 ms, a więc był prawie 5 razy większy. Była to konsekwencja faktu, że mniejszy pęcherzyk przed pęknięciem odbijał się od powierzchni tylko raz, natomiast większy aż 4 razy. Analiza kształtu pęcherzyka podczas zderzenia pozwoliła stwierdzić, że deformacja pęcherzyka podczas zderzenia odpowiedzialna jest za powyżej opisany efekt wydłużenia  $t_c$ . Większy pęcherzyk ulegał większej deformacji, przez co ciekły film, rozdzielający pęcherzyk od granicy międzyfazowej, miał większy promień. Powodowało to, że potrzebował znacznie dłuższego czasu to tego, aby osiągnąć krytyczną grubość pęknięcia, co powodowało wzrost prawdopodobieństwa odbicia pęcherzyka od powierzchni.

## **PROJEKTY BADAWCZE NCN "OPUS"**



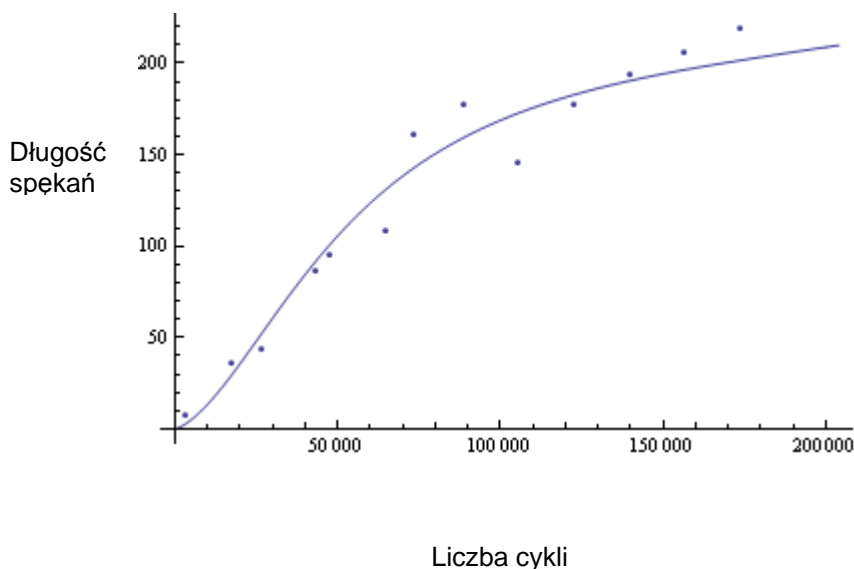
# 1. Mechanizm zniszczeń obrazów panelowych z uwzględnieniem struktury przyrostów rocznych drewna i rzeczywistych fluktuacji klimatu

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

W okresie sprawozdawczym zespół realizujący projekt skupił się na badaniach mających na celu: zbudowanie modelu pozwalającego przewidzieć narastanie spękań gruntu malarskiego poddanego kombinacji cyklicznych odkształceń o dowolnej amplitudzie.

Przeprowadzone testy polegające na jednorazowej zmianie amplitudy odkształceń podczas testu zmęczeniowego z małej na dużą (Lo-Hi) lub z dużej na małą (Hi-Lo) wykazały, że w badanym materiale nie występuje zmniejszenie wytrzymałości zmęczeniowej oraz nie występuje oddziaływanie wzajemne cykli w granicach dokładności prowadzonych pomiarów. Pozwoliło to na potwierdzenie, że w dobrym przybliżeniu zniszczenie ma charakter prostego procesu kumulacyjnego. Oznacza to, że całą historię cykli odkształceń można zawrzeć w jednym parametrze liczbowym  $D$ , nazywanym zmęczeniem, oraz że przyrost zmęczenia spowodowany danym bodźcem zależy tylko od jego amplitudy oraz skumulowanego wcześniej zmęczenia  $D$ . W celu ilościowego opisu procesu zmęczenia wybrano funkcję Hilla ze względu na jej sigmoidalny charakter: szybki wzrost po przekroczeniu wartości granicznej i powolne nasycenie w granicy dużych wartości argumentu. Wyznaczenie parametrów tej funkcji pozwala wyliczyć zmęczenie dla dowolnej historii odkształceń warstwy malarskiej.

Dla weryfikacji przyjętego modelu przeanalizowano narastanie długości spękań warstwy malarskiej poddawanej mieszaniu cykli odkształceń o różnych amplitudach. Rysunek 1 przedstawia przykładowe narastanie zniszczenia wraz z krzywą wyliczoną na podstawie modelu.



Rysunek 1. Narastanie pęknięć spowodowanych mieszaniną bodźców o amplitudach 0.2, 0.3 i 0.4 % odkształcenia w proporcjach odpowiednio 30:3:1.

Opracowany w ramach projektu model będzie podstawą algorytmu symulującego uszkodzenia 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]

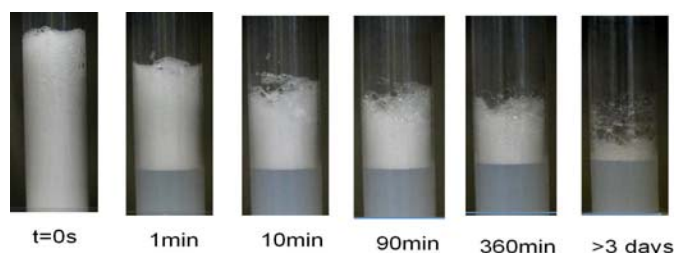
(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

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.

Wykonano pomiary pianotwórczości i stabilności pianowej w kolumnie szklanej dla roztworów chitozanu oraz jego mieszanin z Lauryol Ethyl Arginate (LEA) oraz z wybranymi koloidalnymi nanocząstkami siliki. Metoda pomiaru jest szczegółowo opisana w patencie europejskim przez Lunkenheimer et al. (European Patent EU 1416261).

Wykazano, że roztwory polisacharydów bez żadnych dodatków wykazują niską aktywność powierzchniową. Na ich podstawie niemożliwe było wytworzenie jakiegokolwiek stabilnej warstwy pianowej. Stwierdzono jednak, że dodanie kationowego środka powierzchniowo czynnego Lauryol Etyl Arginate LEA znacznie zwiększało aktywność powierzchniową mieszaniny i umożliwiało formowanie stabilnych ( $T > 1$  godziny), aczkolwiek cienkich warstw piany ciekłej. Podobny efekt uzyskano w przypadku dodania do mieszaniny chitozanu 2% wt. koloidalnych nanocząstek krzemionki Levasil 100/45%, prawdopodobnie z powodu częściowej hydrofobizacji nanocząstek przez polikation (pH 3.5). Wykazano również, że dodanie nanocząstek krzemionki do mieszaniny chitozanu i LEA znacznie zwiększyło stabilność wytworzonej piany dzięki pełnemu zhydrofobizowaniu cząstek przez mieszaninę kationowego środka powierzchniowo czynnego LEA i polikationu chitozanu. Pomiary stabilności piany w 2-wymiarowej rotującej komorze Hele-Shaw udowodniły, że obecność nanocząstek koloidalnych praktycznie hamuje koalescencję sąsiadujących komórek pianowych oraz dyfuzję gazową pomiędzy nimi. Starzenie filmu zachodziło praktycznie tylko na drodze wyciekania cieczy z filmu pianowego, który systematycznie tracił na swojej grubości. Skutkiem tego był jednoczesny i kompletny rozpad całej warstwy pianowej po przekroczeniu pewnej krytycznej wartości grubości w/w cienkiego filmu pianowego. Dodatkowe pomiary przeprowadzone w Scheludko-Excerova cell pozwoliły określić krytyczną grubość filmu pianowego ( $52 \pm 4$  nm) oraz odpowiadające jej ciśnienie rozrywające (90-105 Pa,  $\Delta P \sim 15$  Pa).

Ponadto przeprowadzono za pomocą Profile Analyser Tensiometer PAT-2 pomiary dynamiki zmian napięcia powierzchniowego oraz lepko-elastyczności powierzchniowej. Badania wykazały, że dodatek Levasil 100/45% nanocząstki do mieszaniny chitozanu i Lauryol Ethyl Arginate powoduje wielokrotne zwiększenie elastyczności powierzchniowej roztworu.



Rysunek 1. Stabilność piany wytworzonej z mieszaniny 500ppm chitosan z dodatkiem 100 ppm surfaktantu kationowego Lauryol Ethyl Arginate oraz 2% wt. nanocząstek siliki koloidalnej Levasil 100/45%

### 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)

Celem badań jest zastosowanie 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. Heteropoli związki są znane jako wydajne katalizatory reakcji utleniania i dlatego zostały wybrane jako katalizatory reakcji utleniania fenoli wodą utlenioną w glicerynie.

Pierwszy etap badań polegał na syntezie serii soli kobaltu, manganu i żelaza kwasów fosforowolframowego i fosfomolibdenowego  $H_{3-2x}M_xPX_{12}O_{40}$ , gdzie X = Mo lub W, x = 1/2, 1, 1 1/2. Otrzymane preparaty zostały scharakteryzowane za pomocą spektroskopii FTIR i cyklicznej voltametrii. Ponadto katalizatory badano w reakcji odwodnienia etanolu, która jest reakcją modelową pozwalającą na określenie właściwości kwasowych i redoksowych oraz w reakcji utleniania fenolu wodą utlenioną w obecności gliceryny jako rozpuszczalnika.

Najbardziej aktywnymi katalizatorami reakcji utleniania fenolu w glicerynie są sole żelazowe kwasu fosforowolframowego. Ich aktywność katalityczna jest związana z jednej strony z obecnością centrów kwasowych, a z drugiej strony, z pojawieniem się nowych centrów katalitycznych po wprowadzeniu metalu przejściowego. Natomiast sole manganu i kobaltu obu heteropolikwasów są aktywnymi katalizatorami degradacji fenolu do dwutlenku węgla. Opisane układy katalityczne zostaną, dla porównania, przebadane również w glikolu propylenowym i fluorowej pochodnej gliceryny jako rozpuszczalnikach.

#### 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)

Monomery Cr, Mo i W mogą na powierzchni amorficznej krzemionki przybierać dwie formy: **di-okso**, posiadającą dwie grupy M=O połączoną z nośnikiem przez dwa powierzchniowe atomy tlenu oraz **mono-okso**, posiadającą tylko jedną grupę M=O łączącą się z nośnikiem za pośrednictwem czterech atomów powierzchniowych.

Obliczenia przeprowadzono programem VASP na modelu periodycznym w ramach teorii funkcjonałów gęstości (DFT). Elektrony rdzenia były reprezentowane przez pseudopotencjały PAW a elektrony walencyjne przez fale płaskie. Zastosowano dwa funkcjonały: PBE i PW91. Przyjęty model powierzchni amorficznej krzemionki ma postać warstwy (ang. slab) SiO<sub>2</sub> o dwóch powierzchniach zawierających po 13 grup silanolowych każda.

Analizując rozkład par grup silanolowych na powierzchni znaleziono 27 miejsc zakotwiczenia monomeru di-okso. Miejsca zakotwiczenia podzielono na trzy grupy: (i) pary bliźniacze (ang. geminal), w których obie grupy OH są przyłączone do tego samego atomu krzemu – o najmniejszej swobodzie ruchu; (ii) pary bliskie (ang. vicinal), w których atomy krzemu, do których przyłączone są grupy silanolowe sąsiadują ze sobą tzn. są połączone mostkowym atomem tlenu – o ograniczonej swobodzie ruchu; (iii) pary odległe (ang. non-vicinal), czyli wszystkie pozostałe – o dużej swobodzie ruchu. Wyniki obliczeń pokazują, że o ile monomery zakotwiczone na parach bliźniaczych są zdecydowanie najmniej stabilne o tyle różnice pomiędzy parami bliskimi i dalekimi nie są tak wyraźne, chociaż pary dalekie są, w uśrednieniu, preferowane jako miejsca zakotwiczenia monomeru.

Stabilność monomerów na powierzchni wygodnie jest przedstawiać za pomocą obliczonej energii desorpcji. Monomery potrzebujące większej energii do opuszczenia powierzchni są bardziej stabilne termodynamicznie. Obecność wody bardzo ułatwia desorpcję monomeru, co jest zgodne z doświadczeniem. Szereg stabilności ma postać: W > Mo > Cr.

Monomery di-okso mają geometrię zbliżoną do tetraedru, która jednak może ulegać deformacji na skutek oddziaływania z powierzchnią, głównie poprzez wiązania wodorowe. Wyniki obliczeń jednoznacznie wskazują na istotny wpływ sieci połączeń wodorowych na stabilność

i geometrię monomerów na powierzchni amorficznej krzemionki.

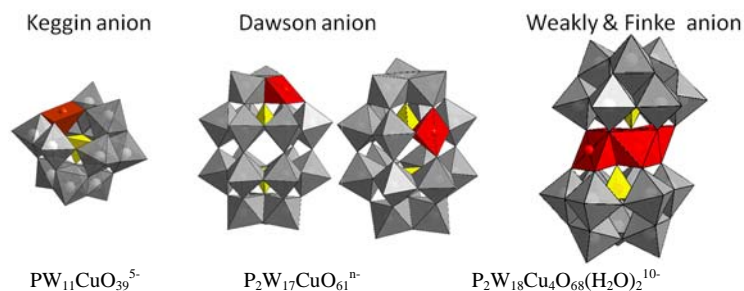
Modyfikacja powierzchni przez podstawienie jednego z atomów krzemu atomem glinu obniża stabilność monomerów di-okso ułożonych w pobliżu o ok. 0.3 eV dla W i Mo oraz o ok. 0.5 eV dla Cr. Jednocześnie, puste poziomy w przerwie wzbronione są przesunięte jeszcze bardziej w kierunku poziomu Fermiego o 0.6, 0.5 i 0.2 eV odpowiednio dla Cr, Mo i W, co jeszcze bardziej ułatwia redukcję metalu w monomerze.

Umieszczenie monomeru typu mono-okso na powierzchni amorficznej krzemionki wymaga utworzenia czterech wiązań z powierzchnią, czyli aż czterech grup silanolowych w odpowiednim ułożeniu. W używanym modelu powierzchni zidentyfikowano tylko jedno takie miejsce. Obliczenia pokazały, że monomery mono-okso chromu są stabilne jedynie przy całkowitym braku wody w układzie. Monomery Mo i W są stabilniejsze, lecz także bardzo czułe na obecność wody.

## 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)

Projekt ma na celu wyznaczenie struktury elektronowej i opis właściwości katalitycznych heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi (Cu-HPA), w których jon(y) Cu zajmują pozycje odpowiednio jonu centralnego, atomu addenda czy kationów kompensujących.



Rysunek 1. Struktury geometryczne badanych układów Cu-HPA

W okresie sprawozdawczym przedmiotem modelowania teoretycznego były heteropolikwasy wolframowe o strukturze Keggina (PWCu) i Dawsona ((PW)<sub>2</sub>Cu), oba z jonem miedzi w pozycji atomu addenda. Dodatkowo prowadzono obliczenia dla heteropolikwasów o strukturze Weakly & Finke, w których klaster zbudowany z czterech atomów Cu, zlokalizowany był pomiędzy dwoma zdefektowanymi anionami Keggina ((PW)<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>). Struktury geometryczne badanych układów przedstawiono na Rysunku 1. Wpływ otoczenia wolframowo-tlenowego, na charakter chemiczny jonów Cu przetestowano, modelując oddziaływanie tych jonów, zlokalizowanych w różnych strukturach heteropolikwasów, z cząsteczką NO.

Obliczenia teoretyczne DFT wykonano stosując model klasterowy i funkcjonal gradientowy PBE. Wpływ rozpuszczalnika (wody i acetonitrylu) uwzględniony został poprzez uśredniony efekt solwatacji (model COSMO).

Wyniki obliczeń pokazują, że we wszystkich układach Cu-HPA, w których jon(y) Cu pozostają w pozycji atomu addenda, pomiędzy głównymi pasmami przewodnictwa a pasmem walencyjnym, pojawiają się dodatkowe piki, których składnikami są głównie orbitale Cu z niewielką domieszką orbitali tlenowych. Szerokość przerwy energetycznej pomiędzy pasmami zmienia się w szeregu: PWCu (1.03) > (PW)<sub>2</sub>Cu (0.87) > (PW)<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub> (0.76). Orbitale graniczne we wszystkich badanych układach składają się z orbitali 3d miedzi z domieszką orbitali 2p tlenów (dla porównania w układach wyjściowych, anionie Keggina i Dawsona, HOMO jest mieszaniną orbitali 2p tlenów mostkowych Ob, Oc, LUMO to orbitale 5d wolframu z niewielką domieszką orbitali 2p tlenów Ob, Oc).

Ładunek na Cu, 0.45, jest niemal identyczny w układach o geometrii Keggina i Dawsona, natomiast na atomach w klasterze miedziowym jest wyższy i wynosi ~0.75. Niesparowany elektron w układach Cu-HPA zlokalizowany jest niemal wyłącznie na atomach miedzi (gęstość spinowa na atomach Cu we wszystkich badanych układach wynosi ~0.5). Jony Cu wprowadzone do struktury polianionu, w pozycji addenda, zmieniają właściwości nukleofilowe centrów aktywnych bezpośrednio z nim związanych.

NO adsorbuje się na centrach miedziowych, bez względu na jego otoczenie geometryczne. Mocniejsze wiązanie Cu-N (rzęd wiązania ~0.9) tworzy się w układach o geometrii anionów Keggina i Dawsona niż w przypadku klastra metalicznego w geometrii anionu Weakly & Finke (rzęd wiązania ~0.7). Wyniki wykonanej analizy NOCV wskazują, że wiązanie N-O ulega osłabieniu, a przepływ elektronów z Cu na NO odbywa się tymi samymi kanałami we wszystkich badanych układach.

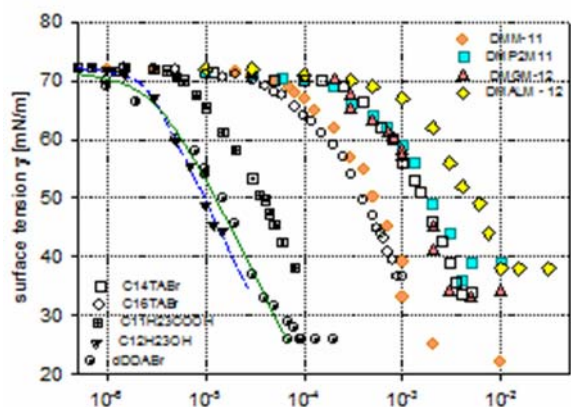


## 6. Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant - polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanoosników

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. Pomiar 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 -CH<sub>2</sub>- i wiązanie estrowe pomiędzy polarną grupą amoniową i łańcuchem węglowodorowym -C<sub>11</sub>H<sub>23</sub>-. Izoterma napięcia powierzchniowego DMGM-12, z jedną grupą CH<sub>2</sub>- i wiązaniem karbonylowym pomiędzy grupą amoniową i łańcuchem -C<sub>12</sub>H<sub>25</sub>- 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 CH<sub>3</sub>(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<sup>+</sup>-dodekian<sup>-</sup> jest podobna do struktury dDDABr. Można oczekiwać, że oddziaływanie tego typu surfaktantów z polielektrolitami będzie zależne od pH środowiska.



Rysunek 1. Eksperymentalne izotermie 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.

Opracowano metodę otrzymywania enzymu z wybranym metalem przejściowym, zawartość metali potwierdzono metodą ICP-OES. Opracowano metodę HPLC do identyfikacji i ilościowego oznaczania organicznych produktów reakcji katalitycznych Fe-ARD oraz Ni-ARD. Zbadano stechiometrię reakcji katalitycznych Fe-ARD oraz Ni-ARD dla enzymu ludzkiego oraz bakteryjnego (*Bacillus anthracis*) potwierdzając zależność specyficzności reakcji od rodzaju jonu metalu związanego w miejscu aktywnym enzymu. Dla formy Fe-ARD wykonano pomiary spektroskopią Mossbauera dla formy natywnej oraz w kompleksie z substratem, uzyskane widma przemawiają za zmianą struktury strefy koordynacyjnej żelaza towarzyszącej wiązaniu substratu. Wykonano badania obliczeniowe nad mechanizmami reakcji dwóch syntetycznych kompleksów nieorganicznych, które katalizują reakcje modelowe dla ARD, w tym dla kompleksu z Fe(II) katalizującym, w zależności od obecności lub braku wody w układzie, reakcję typową dla Ni-ARD i Fe-ARD. Uzyskane wyniki pokazują, że cząsteczka wody uwadniając substrat pełni rolę protektora uniemożliwiającego zajście reakcji typowej dla Ni-ARD, a żelazo wykazuje aktywność red-oks na krytycznym etapie rozcięcia wiązania O-O.

Opracowane procedury oraz uzyskane wyniki 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 H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>

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

(kierownik projektu: dr hab. Ryszard Grabowski prof IKiFP)

Celem projektu jest wyjaśnienie zależności pomiędzy właściwościami układu katalitycznego a jego działaniem w oparciu o reakcję syntezy eteru dimetylowego (DME) z mieszaniny H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>.

Katalizatory o składzie 10moliCu/90moliZrO<sub>2</sub>, otrzymane w wyniku współstrącania (przy użyciu różnych czynników strącających: Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, NaOH), jak i metodą cytrynianową, były modyfikowane promotorami metalicznymi Ga, Mn, Cr, Ag, w ilości 3% wag. Tak otrzymane próbki scharakteryzowano metodami: H<sub>2</sub>TPR, BET, specyficzną adsorpcją N<sub>2</sub>O (powierzchnia właściwa Cu) oraz XRD. Dla badanych katalizatorów zaobserwowano zmiany we właściwościach redukcyjnych, teksturalnych oraz w wielkości powierzchni właściwej miedzi. Zmiany te zależą zarówno od metody preparatyki, jak i rodzaju wprowadzonego promotora. Metoda cytrynianowa i współstrącania z NaOH prowadzi do otrzymania katalizatorów, dla których profile H<sub>2</sub>TPR mają złożony charakter (dwa lub więcej maksimumów redukcji); natomiast katalizatory otrzymane metodą współstrącania przy użyciu Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> charakteryzują się jednym maksimumem redukcyjnym. Dodatek promotora prowadzi do zmian w profilu redukcji, jak i do obniżenia temperatury maksimum redukcji. Zmiany w powierzchni właściwej w zależności od metody preparatyki opisuje poniższa nierówność:

metoda współstrącania z NaOH > metoda cytrynianowa > metoda współstrącania z Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>

Natomiast wprowadzenie promotorów zwiększa powierzchnie właściwe dla preparatów otrzymanych metodą NaOH, a w przypadku pozostałych katalizatorów albo jej nie zmienia (współstrącanie z Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>), albo wpływ dodatków nie jest jednoznaczny. Wielkości porów dla wszystkich katalizatorów otrzymanych za pomocą trzech metod preparatyki są praktycznie takie same, natomiast obserwuje się zmiany w ich objętości. Katalizatory otrzymane metodą z NaOH wykazują najwyższą objętość porów.

Pomiary powierzchni właściwej miedzi wyznaczonej przy użyciu adsorpcji N<sub>2</sub>O wykazały, że najwyższe powierzchnie właściwe Cu uzyskuje się za pomocą metody współstrącania przy użyciu NaOH.

Osobno prowadzone były prace nad wpływem składu fazowego nośnika ZrO<sub>2</sub> na właściwości katalityczne układu Cu/ZrO<sub>2</sub>, tj. na aktywność tych katalizatorów w reakcji tworzenia CH<sub>3</sub>OH, który jest produktem pośrednim w syntezie DME. Wykazano, że faza tetragonalna ZrO<sub>2</sub> sprzyja tworzeniu centrów typu "powierzchniowa wakancja tlenowa ZrO<sub>2</sub>-Cu<sup>+1</sup>", które to centra, jak wiadomo, są odpowiedzialne za aktywność katalityczną w reakcji syntezy CH<sub>3</sub>OH/DME z mieszaniny CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>.

Ponadto, w ramach niniejszego projektu rozbudowano i unowocześniono istniejącą w Instytucie aparaturę próżniową do badań w podczerwieni cząstek zaadsorbowanych, pod kątem badań zaplanowanych w 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: prof. Bogdan Sulikowski)

Celem projektu jest zaprojektowanie, otrzymanie i scharakteryzowanie nowych materiałów o hierarchicznej strukturze porowatej. Podstawowym celem poznawczym jest opracowanie nowej, efektywnej procedury otrzymywania materiałów glinokrzemianowych o multimodalnej strukturze porowatej, złożonej z mikroporów oraz mezoporów o różnej wielkości, w oparciu o układy zeolito-podobne. Nowoczesne materiały tego typu będą mogły znaleźć w przyszłości zastosowanie między innymi jako efektywne katalizatory do procesów transformacji cząsteczek organicznych w fazie ciekłej.

Opracowano powtarzalną procedurę preparatyki stabilnych, monodispersyjnych zawiesin nanocząstek zeolitu Al-MFI. W celu wygenerowania centrów aktywnych, w syntezie obok źródła krzemu wykorzystano związek glinu, *tri-sec*-butanolan glinu. W syntezach nie stosowano zasad nieorganicznych. W przypadku generowania centrów kwasowych w nanocząstkach nie zachodzi wówczas potrzeba wymiany jonowej kationu alkalicznego równoważącego ujemny ładunek sieci na protony lub jony amonowe. Z kolei opracowano powtarzalny protokół syntezy zawiesiny cząstek protozeolitycznych Al-BEA o następujących modułach krzemowych: 12, 25, 40 oraz 70. Źródłem krzemu był TEOS, natomiast źródłem glinu *tri-sec*-butanolan glinu. Po zmieszaniu składników w odpowiedni sposób syntezy prowadzono w czasie kilku dni w temperaturze 50 °C.

Preparaty zbadano metodą dynamicznego rozpraszania światła (DLS), która pozwala na monitorowanie wzrostu kryształów w czasie syntezy. Pomiarzy prowadzono po ukończeniu syntezy lub w jej trakcie. Wszystkie syntezy prowadziły do zawiesin cząstek protozeolitycznych. Pierwsze nanocząstki o wielkości około 3-4 nm tworzyły się już po 30 minutach prowadzenia syntezy. Wielkości cząstek zmieniały się w zależności od stosunku krzemu do glinu w wyjściowej mieszaninie. W jednym przypadku obserwowano niezmienną wielkości nanocząstek podczas trwania całego procesu (protoBEA40). Zbadano zawiesiny protozeolityczne o modułach krzemowych Si/Al w żelu wynoszących 12, 25 oraz 40. Stwierdzono, że synteza przebiegała poprzez dwa mechanizmy: (a) agregację mniejszych cząstek (od ok. 1 do ok. 3 nm) do większych (ok. 4 nm), lub (b) rozpad dużych aglomeratów na mniejsze (od wielkości ok. 4 μm do ok. 4 nm).

Zawiesiny protozeolityczne zliofilizowano, a następnie poddano ostrożnej kalcynacji w przepływie powietrza w dwustopniowym procesie. Próbkę zbadano przy użyciu dyfraktometru proszkowego w zakresie nisko- i wysokokątowym. Analizy XRD wykonano dla próbek przed i po kalcynacji. Zakres niskokątowy wykorzystano do stwierdzenia obecności mezoporów w preparatach. Stosunki odległości międzypłaszczyznowych odpowiadających kolejnym refleksom na dyfraktogramach, potwierdziły powstanie struktur warstwowych o wysokim, chociaż nie idealnym, uporządkowaniu.

Otrzymane preparaty zbadano metodą spektroskopii NMR w ciele stałym. Określono czasy relaksacji i otrzymano widma krzemowe <sup>29</sup>Si MAS NMR. Wykonano także widma glinowe <sup>27</sup>Al MAS NMR, które pozwoliły na zbadanie koordynacji i dystrybucji glinu w próbkach. Dla wybranych próbek wykonano badania kwasowości metodą programowanej termodesorpcji amoniaku. Ponadto wykonano badania próbek metodą skaningowej mikroskopii elektronowej.

## 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)

Zgodnie z harmonogramem projektu realizowano następujące zadania badawcze:

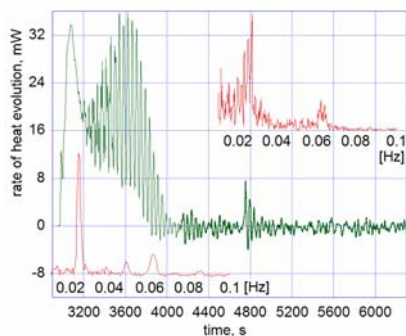
1. Zakup aparatury (zadanie zakończone). W ramach zadania zakupiono:
  - a) Suszarkę próżniową z oprzyrządowaniem (pompą próżniową, połączeniami wymaganymi przy stosowaniu próżni)
  - b) Biuretę do precyzyjnego dozowania wodoru
  - c) Urządzenie do pobierania próbek
2. Synteza zmodyfikowanych nośników (zadanie zakończone)  
Przygotowano 3 nośniki polimerowe modyfikowane aminami chiralnymi, tj. (S,S-1,2-dwufenyloetylenodiaminą, R,R-1,2-dwufenyloetylenodiaminą oraz (1S,2S)-N,N'-dimetylo-1,2-difenilo-1,2-etylenodiaminą.
3. Charakterystyka zmodyfikowanych nośników (zadanie w trakcie realizacji)  
Zmodyfikowane nośniki zostały scharakteryzowane z zastosowaniem techniki skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM) oraz spektroskopii w zakresie podczerwieni.
4. Synteza katalizatorów rutenowych (zadanie w trakcie realizacji)  
Rozpoczęto syntezy katalizatorów Ru(0) osadzonych na zmodyfikowanych żywicach polimerowych.
5. Badania katalityczne (zadanie w trakcie realizacji)  
Badania katalityczne objęły:
  1. Optymalizację warunków uwodornienia acetalu (badano m.in. wpływ rozpuszczalnika, ilości katalizatora, stężenia acetalu, stężenia fazy aktywnej oraz szybkości mieszania na stopień konwersji);
  2. Opracowanie metody badania postępu reakcji z wykorzystaniem chromatografu gazowego;
  3. Przeprowadzenie kilkunastu testów katalitycznych z wykorzystaniem katalizatorów Ru(0) osadzonych na materiałach typu SBA-15.

# 11. Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór

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

(kierownik projektu: dr Erwin Lalik)

Nieustające, aperiodyczne oscylacje w układzie Pd/H(D) będącym w równowadze dynamicznej zostały odkryte dla pewnej wielkości ziaren proszku palladowego (Rysunek 1). Aby potwierdzić ich deterministyczną naturę, przeprowadzono matematyczny test, opracowany z wykorzystaniem nowego twierdzenia poprzednio zaproponowanego i udowodnionego przez autora.



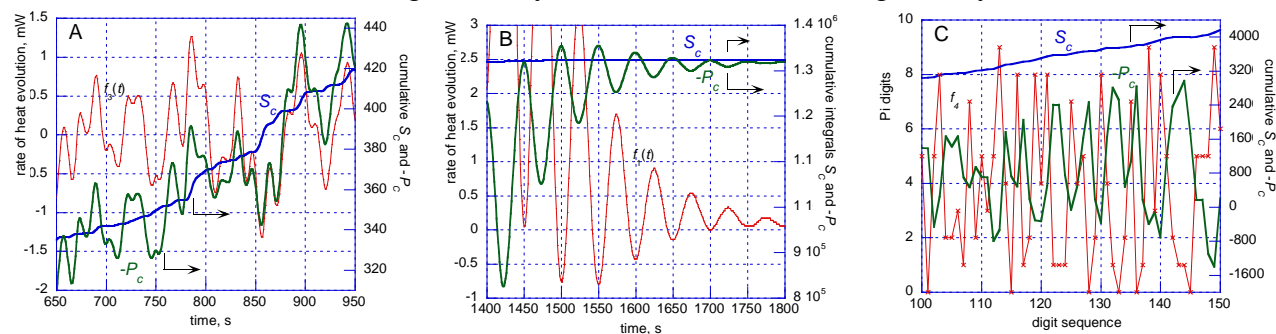
Rysunek 1. Termokinetyczne oscylacje podczas sorpcji D<sub>2</sub> (z domieszką ok. 10 % gazu szlachetnego) w proszku palladowym w temp. 87 °C. Nietłumione aperiodyczne oscylacje pojawiają się gdy próbka Pd jest już nasycona deuterem (przy ok. 4000 s), po okresie periodycznych oscylacji towarzyszących sorpcji zachodzącej z dala od równowagi dynamicznej. Kolorem czerwonym pokazano transformaty Fouriera, osobno dla okresu periodycznych (lewa dolna) i aperiodycznych oscylacji (prawa górna). Używając nowego twierdzenia, pokazano, że aperiodyczne oscylacje reprezentują zjawisko matematycznego chaosu, nie zaś przebiegu przypadkowego. Według naszej wiedzy, jest to pierwszy raz zaobserwowany przypadek matematycznego chaosu w układzie Pd/H.

Rozważmy funkcję  $f(x)$ , gładką, ciągłą i taką, że istnieje całka z jej kwadratu w przedziale

$[a, b] \subset \mathbb{R}$ . Jeśli  $f(x)$  ma miejsca zerowe w punktach  $a$  i  $b$  to prawdziwa jest następująca zależność:

$$-\int_a^x \left( \frac{d[f(x)]}{dx} \int_a^x f(t) dt \right) dx = \int_a^x [f(x)]^2 dx \quad (1)$$

Prawą i lewą stronę (1) nazwiemy odpowiednio  $S_C$  i  $P_C$ . Wykresy przedstawiające całkę  $S_C$  i ujemną całkę  $P_C$  (oznaczoną  $-P_C$ ) przecinają się dla  $f(x)=0$ , to jest w punktach miejsc zerowych wyjściowej funkcji  $f(x)$ . Zatem, jeśli użyjemy eksperymentalnego zbioru w miejsce wyjściowej  $f(x)$ , to oczekujemy, że wszystkie przecięcia wykresów  $S_C$  i  $P_C$  powinny znaleźć się w punktach miejsc zerowych badanego zbioru, jeśli jest on deterministyczny. Rysunek 2 porównuje zachowanie krzywych  $S_C$  i  $-P_C$  dla badanych oscylacji aperiodycznych (2A) do przypadku oscylacji periodycznych (tym samym deterministycznych) obserwowanych poprzednio dla układu Pd/H (2B), oraz do zachowania szeregu 3000 cyfr rozszerzenia dziesiętnego liczby  $\pi$  (2C).



Rysunek 2. Użycie równania (1) jako testu na determinizm w krzywych eksperymentalnych (A, B) w porównaniu do przypadkowego szeregu cyfr po przecinku liczby  $\pi$  (C). Na determinizm wskazują przecięcia krzywych  $S_C$  (niebieska) i  $P_C$  (zielona, wykreślona względem prawej osi) przypadająca w miejscach zerowych oryginalnych krzywych (czerwone, wykreślone względem lewej osi). Oscylacje aperiodyczne i deterministyczne, oraz przypadkowy szereg są wizualnie podobne i jedynie kontrastowo różne zachowanie odpowiednich krzywych  $S_C$  i  $-P_C$  wyraźnie pokazuje różnicę.

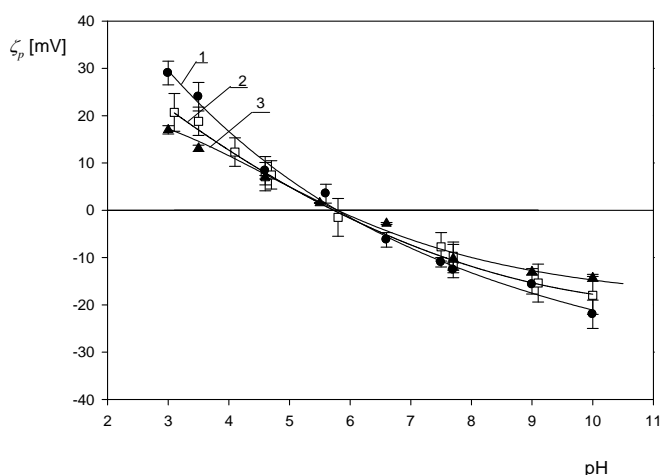
Rysunki 2A i B oznaczają determinizm, ponieważ każdemu miejscu zerowemu wyjściowej krzywej (czerwona linia), odpowiada punkt przecięcia niebieskiej krzywej  $S_C$  i zielonej  $-P_C$  zgodnie z (1). Rysunek 3C pokazuje, że krzywe  $S_C$  i  $-P_C$  otrzymane dla przypadkowego szeregu liczb nigdy się nie przecinają, z wyjątkiem początku w zerze. W konkluzji, aperiodyczne oscylacje stanowią przykład chaotycznej dynamiki w reakcji wodoru/deuteru z metalicznym palladem.

## 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)

Adsorpcja immunoglobulin (antyciał) na powierzchniach granicznych, w szczególności na powierzchniach nośników koloidalnych jest najważniejszym etapem rozdzału chromatograficznego tych białek oraz testów immunologicznych. Jednakże, pomimo istotnego znaczenia tych procesów oraz przeprowadzania licznych badań brak jest ilościowego opisu kinetyki oraz mechanizmów fizykochemicznych tych procesów. Jest to związane głównie z niepełną charakterystyką fizykochemiczną tych białek oraz niedostatkim metod eksperymentalnych umożliwiających bezpośrednie pomiary w warunkach *in situ*. W związku z tym, głównym celem przeprowadzonych badań była pełna charakterystyka fizykochemiczna roztworów objętościowych immunoglobuliny G w oparciu o pomiary dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz pomiary ruchliwości elektroforetycznej. Znając te podstawowe parametry dokonać można ilościowej interpretacji pomiarów kinetyki adsorpcji immunoglobulin na powierzchni miki, która jest modelowym substratem charakteryzującym się precyzyjnie kontrolowanymi właściwościami powierzchniowych, min. ładunkiem powierzchniowym oraz molekularną gładkością. Dzięki temu można wyznaczyć w sposób bezpośredni pokrycie cząsteczek immunoglobulin stosując metodę obrazowania AFM. Tak więc, w pierwszym etapie badań przeprowadzono pomiary ruchliwości elektroforetycznej immunoglobuliny G w funkcji pH dla ustalonych wartości sił jonowych, regulowanych przez dodatek NaCl. Znając ten parametr, obliczano potencjał zeta cząsteczek  $\zeta_p$  z równania Henry'ego. Zależności  $\zeta_p$  od pH wyznaczone w ten sposób są pokazane na Rys 1. Jak można zauważyć, dla siły jonowej  $10^{-3}$  M,  $\zeta_p$  maleje od wartości 24 mV dla pH 3,5 do -16 mV for pH 9,1. Dla siły jonowej 0.15 M,  $\zeta_p$  zmienia się od 13 mV dla pH 3,5 do -11 mV dla pH 9,1. Ponadto, dla wszystkich sił jonowych,  $\zeta_p$  jest równe zero dla pH 5.8, co wskazuje, że jest to punkt izoelektryczny cząsteczek immunoglobuliny. Jest to parametr o podstawowym znaczeniu dla określania zakresu stabilności roztworów białka oraz jego oddziaływania z powierzchniami stałymi odpowiedzialnymi za procesy adsorpcji.



Rysunek 1. Zależność potencjału zeta  $\zeta_p$  cząsteczek immunoglobuliny G, od pH ( $T = 293$  K). Punkty oznaczają dane doświadczalne wyznaczone przy pomocy mikroelektroforezy dla następujących sił jonowych: 1-(●)  $10^{-3}$  M NaCl, 2- (□)  $10^{-2}$  M NaCl, 3- (▲) 0.15 M NaCl. Linie ciągłe oznaczają interpolację nieliniową danych doświadczalnych.

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

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

Ważnym czynnikiem określenie wykorzystania biomateriałów jest ich oddziaływanie z płynami ustrojowymi. To oddziaływanie określa zgodność biologiczną danego materiału. Dlatego kwestia adsorpcji białka na powierzchni ciał stałych jest bardzo aktualna i ważna. Rozwój nowych technik badawczych umożliwia badanie adsorpcji z coraz większą dokładnością, poczynając od prostych pomiarów kinetyki adsorpcji przy wysokim stężeniu białka do możliwości wykrycia nawet pojedynczej cząsteczki białka zaadsorbowanego na powierzchni adsorpcyjnej. Jest również możliwe śledzenie zarówno zmiany orientacji jak i właściwości strukturalnych białek w postaci zaadsorbowanej.

Celem badań jest poszerzenie wiedzy na temat adsorpcji globularnych białek na powierzchniach biokompatybilnych przy użyciu szerokiego spektrum technik analitycznych, w tym mikrowagi kwarcowej z monitorowaniem rozpraszania energii (QCM-D) oraz rezonansu plazmonów powierzchniowych (SPR-MP). MP-SPR i QCM-D są to bardzo czułe metody, które umożliwiają w czasie rzeczywistym, jakościowe, bezznacznikowe i nieinwazyjne wykrywanie białek zaadsorbowanych na powierzchniach stałych. Połączenie powyższych technik dostarcza istotnych informacji na temat mechanizmów odpowiadających za oddziaływanie białko-powierzchnia adsorpcyjna, zmian strukturalnych oraz ich molekularnej reorientacji. Prace prowadzono dwukierunkowo: doświadczalnie i teoretycznie przy wykorzystaniu dynamiki molekularnej (MD). Projekt ten daje nowe perspektywy dla rozwoju strategii immobilizacji białek/enzymów dla zastosowań biomedycznych czy też otrzymywania biosensorów.

Ponadto, rozwój metod teoretycznych pozwala określić zarówno wyznaczenie najważniejszych aminokwasów rządzących adsorpcją cząsteczek białkowych z powierzchnią, a także daje możliwość wizualizacji całego procesu na poziomie atomowym. Połączenie badań eksperymentalnych z obliczeniami teoretycznymi powinno umożliwić dalszy postęp w zrozumieniu zachowania białek na powierzchniach stałych.



#### 14. Synteza kompozytów zawierających nanocząstki metali (Fe, Mn, Pd) i porowate, domieszkowane azotem materiały węglowe o różnej morfologii ziaren oraz charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych w reakcji redukcji tlenu”

Projekt badawczy "Opus" NCN 2013/11/B/ST5/01417 [2014-2016]

(kierownik projektu: dr Aleksandra Pacuła)

Wykonano serię syntez materiałów o strukturze warstwowych podwójnych wodorotlenków. Otrzymano preparaty (próbki proszkowe) różniące się zarówno składem chemicznym (magnezowo-glinowe, magnezowo-żelazowo-glinowe, magnezowo-manganowo-glinowe) jak i zawartością jonów metali przejściowych (Fe lub Mn). Nominalny stosunek molowy kationów dwu- i trójwartościowych wynosił 3. Synteza materiału o strukturze hydrotalkitu polegała na strąceniu osadu za pomocą zasady sodowej przy stałym pH (pH=10) z wodnego roztworu zawierającego sole metali dwu ( $Mg^{2+}$  i/lub  $Mn^{2+}$ ) i trójwartościowych ( $Fe^{3+}$  i/lub  $Al^{3+}$ ). Syntezę trwającą ok. 30 minut przeprowadzono w temperaturze pokojowej stosując 30 minutowe starzenie strąconego osadu. Po wydzieleniu osadu i przemyciu wodą destylowaną mokry preparat wysuszono w powietrzu w temperaturze 50 °C. Suchy materiał rozdrobiono w moździerzu agatowym.

Nazwa próbki	Materiał o strukturze warstwowych podwójnych wodorotlenków	Stosunek molowy (Mg:Al lub Mg:Mn:Al lub Mg:Fe:Al) w wyjściowym roztworze
MA-1	Mg:Al = 3:1	0.060 : 0.020
MA-2	Mg:Fe+Al = 3:1	0.060 : 0.0075 : 0.0125
MA-3	Mg:Fe+Al = 3:1	0.060 : 0.000375 : 0.01625
MA-4	Mg+Mn:Al = 3:1	0.0525 : 0.0075 : 0.020
MA-5	Mg+Mn:Al = 3:1	0.05625 : 0.00375 : 0.020

Jednorodne proszki scharakteryzowano za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD) w celu określenia ich składu fazowego i struktury oraz przeprowadzono analizę chemiczną metodą ICP OES w celu oznaczenia rzeczywistego udziału poszczególnych pierwiastków metalicznych.

Następnie preparaty po potwierdzeniu składu jakościowo-ilościowego przeznaczono do syntezy kompozytów zawierających porowate, domieszkowane azotem materiały węglowe o różnej morfologii ziaren oraz nanocząstki metali (Fe lub Mn).

## 15. Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania na osnowie organosmektytów interkalowanych odwróconymi micelami zawierającymi nanostruktury typu wodorotlenków i hydrotalkitów

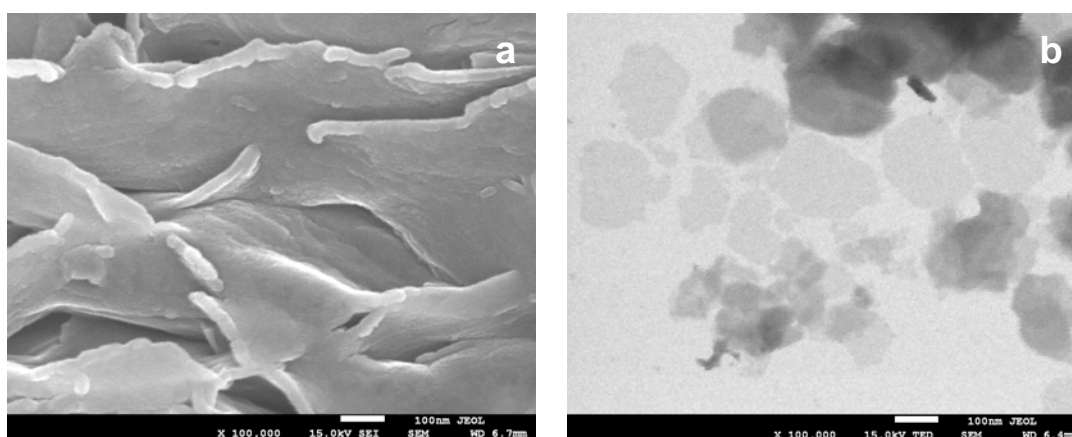
Projekt badawczy "Opus" NCN UMO-2013/09/B/ST5/00983 [20014-2017]

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Celem badań jest zaprojektowanie i synteza nowej klasy aktywnych i termicznie stabilnych tlenkowych katalizatorów pełnego utleniania, mogących stanowić alternatywę dla kosztownych katalizatorów wykorzystujących metale szlachetne z grupy platynowców. Zaproponowane podejście zasadza się na połączeniu dwóch syntetycznych procedur: jednej, prowadzącej do otrzymania organopochodnych warstwowych krzemianów typu smektytów oraz drugiej, polegającej na wytworzeniu nanocząstek tlenkowych metodą odwróconych miceli. Zaproponowane badania mają istotne znaczenie nie tylko dla katalizy, ale również dla wszystkich obszarów inżynierii materiałowej, w których pożądane jest wytworzenie stabilnych termicznie, zdyspergowanych nanocząstek tlenków.

W pierwszych miesiącach realizacji projektu prowadzono badania nad procesem spęczniania i delaminacją smektytów porównując ich zachowanie w środowisku wodnym i w cieczach organicznych. Spęcznianiu poddawano sodową, wapniową i decylotrimetyloamoniową formę montmorillonitu z Jelšovego Potoku (Słowacja). Otrzymane układy badano metodą XRD, SEM/TEM, EDS, FTIR.

Wykazano, że w środowisku wodnym rodzaj kationu kompensującego w przestrzeni międzypakietowej ma zasadniczy wpływ na pęcznienie smektytu. Zachodzi ono łatwo dla formy sodowej i wapniowej, przy czym dla tej ostatniej w mniejszym stopniu, natomiast nie zachodzi w ogóle dla formy organomineralnej. Z kolei organopochodna montmorillonitu pęcznieje, a nawet ulega delaminacji na skutek traktowania 1-oktanołem (Rysunek 1), podczas gdy odległości międzypakietowe formy sodowej i wapniowej nie ulegają zmianie. Formy spęczniałe w wodzie przyjmowały z łatwością w obszar międzypakietowy oligomeryczne oksy-hydroksykationy metali.



Rysunek 1. Obrazy SEM i TEM organopochodnej montmorillonitu (DTMA-mt)  
a) przed delaminacją w 1-oktanolu, b) po delaminacji w 1-oktanolu.

Uzyskane wyniki posłużą do opracowania dalszych etapów syntezy prowadzących do interkalacji tlenko-wodorotlenkowych faz aktywnych katalitycznie pomiędzy pakietami smektytu.



## **PROJEKTY BADAWCZE NCN "PRELUDIUM"**

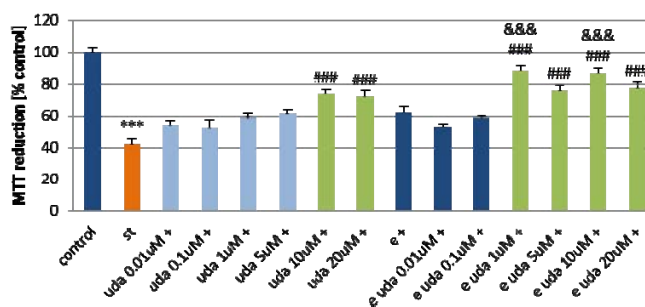


# 1. Synteza biozgodnych nanonośników dla wybranych substancji neuroprotektyjnych

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

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

Do syntezy nanonośników (nanokapsulek) wykorzystane zostały metody rozwinięte w Instytucie polegające na enkapsulacji emulsyjnych rdzeni poprzez sekwencyjną adsorpcję biokompatybilnych polielektrolitów. Nanonośniki zostały zmodyfikowane powierzchniowo poprzez zastosowanie kopolimerów polielektrolit-glikol polietylenowy w celu uzyskania maksymalnej biozgodności. Enkapsulację wybranych leków neuroprotektyjnych uzyskano poprzez ich rozpuszczenie w fazie olejowej przed procesem emulsyfikacji. Średnice otrzymanych nanokapsulek wynosiły ~80nm oraz wzrastały wraz z ilością zaadsorbowanych warstw polielektrolitowych do ~100nm (dla 10 warstw). Naprzemienne wartości potencjału zeta dowiodły adsorpcji kolejnych warstw polielektrolitowych na rdzeniach nanokapsulek. W wyniku syntezy uzyskano maksymalne stężenie nanokapsulek  $\sim 5.7 \times 10^{10}$  cząstek/ml. Nanokapsułki pokryte polielektrolitami naturalnymi (alginian sodu, chitosan) oraz biozgodnymi polielektrolitami syntetycznymi (np. PLL, PGA), a także nanokapsułki PEG-yłowane okazały się nietoksyczne dla komórek SH-SY5Y, dlatego zostały wybrane jako nanonośniki dla substancji neuroochronnych. W celu zbadania neuroprotekcji nanokapsulek opracowano model uszkodzenia komórek neuroblastomy. Jako modelowe czynniki neurodegeneracyjne wybrano: nadtlenek wodoru ( $H_2O_2$ ), staurosporynę (St) i doksorubicynę (DOX). Komórki inkubowane z modelowymi neurotoksynami wraz z substancjami neuroprotektyjnymi (MDL 28170 oraz kwasem undecylenowym - UDA) wykazały istotnie statystycznie większą żywotność niż z samymi czynnikami uszkodzającymi (Rysunek 1).



**Rysunek 1.** Biochemiczny test żywotności komórek (MTT). Jako modelowy czynnik neurodegeneracyjny wykorzystano staurosporynę (St), natomiast jako lek zastosowano kwas undecylenowy (UDA). Kolorem zielonym zaznaczono neuroprotektyjne działanie leku podanego bezpośrednio do medium hodowlanego oraz leku podanego do medium w formie nanokapsulek (e).

Co więcej, MDL 28170 oraz UDA zamknięte w nanokapsułkach wykazały działanie neuroochronne w niższych dawkach niż leki bezpośrednio podane do medium hodowlanego z komórkami. Wyniki są istotne z farmakologicznego punktu widzenia, gdyż zastosowanie niższej dawki leku może powodować mniejsze ewentualne skutki uboczne.

Otrzymane wyniki badań mają bardzo duże znaczenie poznawcze. Mogą przyczynić się do wykorzystania nanotechnologii w nowoczesnej farmakologii molekularnej poprzez rozwój nowych strategii hamowania procesów neurodegeneracyjnych.

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

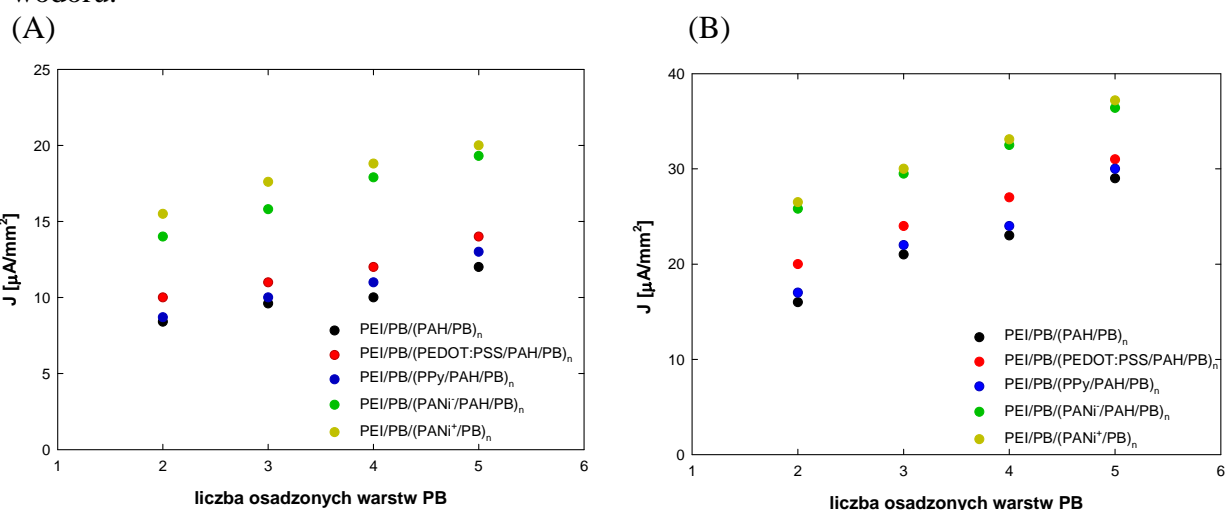
Projekt badawczy "Preludium" NCN 2012/07/N/ST4/00350 [2013-2015]

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

Odkrycie elektroaktywnych właściwości błękitu pruskiego (PB) przyczyniło się do jego zastosowania w wielu dziedzinach nauki i techniki. Jednym z nich jest elektrochemiczna detekcja nadtlenu wodoru, gdyż PB może katalizować zarówno reakcje utleniania jak i redukcji tego związku. Skuteczne monitorowanie stężenia nadtlenu wodoru ( $H_2O_2$ ) jest bardzo ważne 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 rozwoju prostej i uniwersalnej elektrochemicznej metody detekcji  $H_2O_2$ .

Badania prowadzone w 2014 roku miały na celu określenie elektrokatalitycznej aktywności dla procesu redox nadtlenu wodoru wielowarstwowych filmów PE/PB zmodyfikowanych polimerami przewodzącymi. Uzyskane wyniki zilustrowane na Rysunku 1. sugerują, iż wraz ze wzrostem liczby osadzonych warstw nanocząstek PB wzrasta gęstość prądu zarówno dla piku utleniania jak i redukcji  $H_2O_2$ . Ponadto obecność polielektrolitów przewodzących w strukturze wielowarstwowych filmów wzmacnia ich odpowiedź prądową dla nadtlenu wodoru przy czym wartość natężenie prądu uzależnione jest od rodzaju zastosowanego polimeru. Wartości gęstości prądu w przypadku wielowarstwowych filmów modyfikowanych polimerami przewodzącymi w stosunku do filmów niemodyfikowanych wzrastają w zależności od rodzaju polimeru o około 20-30%. Największe wartości natężenia prądu zarówno dla procesu utleniania jak i redukcji  $H_2O_2$  zanotowano dla wielowarstwowych filmów PE/PB zawierających polianilinę. Były one tylko nieco wyższe dla formy kationowej polianiliny.

Otrzymane wyniki mogą przyczynić się w przyszłości do udoskonalenia sensorów, których działanie opiera się na wykorzystaniu nanocząstek PB do elektrochemicznej detekcji nadtlenu wodoru.



Rysunek 1. Zależność gęstości prądu dla utleniania (A) i redukcji (B)  $H_2O_2$  dla warstw PEI/PB/(PAH/PB)<sub>n</sub> (czarne punkty), PEI/PB/(PEDOT:PSS/PAH/PB)<sub>n</sub> (czerwone punkty), PEI/PB/(PPy/PAH/PB)<sub>n</sub> (niebieskie punkty), PEI/PB/(PANi/PAH/PB)<sub>n</sub> (zielone punkty) oraz PEI/PB/(PANi<sup>+</sup>/PB)<sub>n</sub> (żółte punkty). Pomiary wykonano w 0.1M KCl w obecności 5mM  $H_2O_2$ .

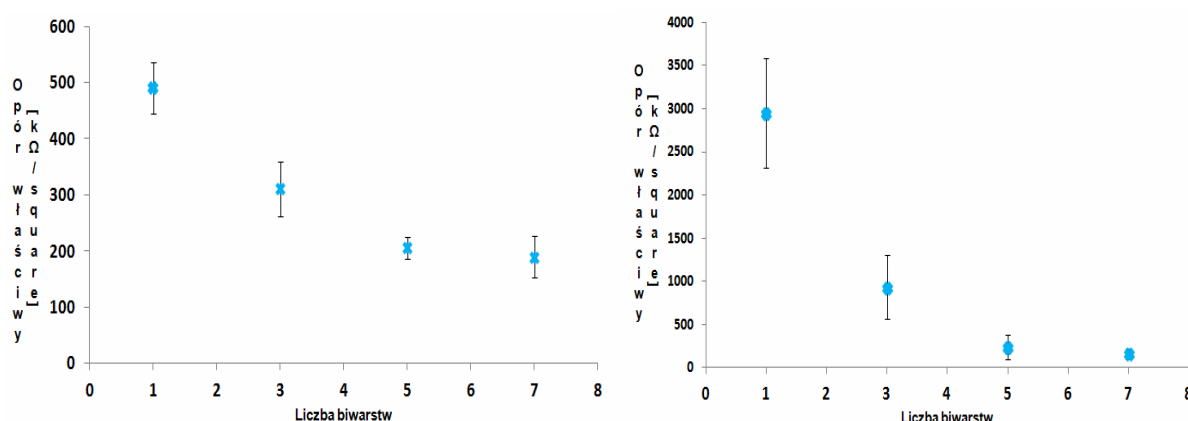
### 3. Wielowarstwowe filmy polimerowe zawierające nanocząstki oraz grafen jako funkcjonalne powłoki i membrany

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 zostanie przeprowadzona poprzez inkorporacje w ich strukturę nano-objektów, nanocząstek metalicznych, tlenkowych, tlenku grafenu oraz jego zredukowanej formy. Alternatywną metodą funkcjonalizacji będzie powierzchniowa modyfikacja takich filmów. Filmy takie będą mogły znaleźć zastosowanie jako powłoki o różnych właściwościach i funkcjach.

Głównym zadaniem w omawianym okresie sprawozdawczym była charakterystyka fizykochemiczna tlenku grafenu oraz tworzenie filmów polielektrolitowych zawierających polietylenoiminę (PEI), tlenek grafenu(GO)/zredukowany tlenek grafenu(rGO)/grafen. Wykorzystując różne metody redukcji tlenku grafenu (chemiczna, elektrochemiczna, termiczna, UV), wybrano na podstawie analizy XPS metodę termiczną, redukcja  $>180^{\circ}\text{C}$ , jako najbardziej efektywną prowadzącą do formowania hybrydyzacji  $\text{sp}^2$  wiązań atomów węgla. W celu formowania wielowarstwowych filmów polimerowych o właściwościach przewodzących zawierających tlenek grafenu wykorzystano metodę "warstwa po warstwie" (LbL). Otrzymane filmy zostały scharakteryzowane różnymi metodami spektroskopowymi oraz mikroskopowymi; elipsometria spektralna, spektroskopia IR, spektrofotometria UV-VIS, oraz za pomocą mikroskopii SEM. Filmy zawierające tlenek grafenu zostały poddane modyfikacji, która została przeprowadzona *in-situ* w celu redukcji GO w strukturze filmu. Redukcję termiczną prowadzono w różnych temperaturach  $150^{\circ}\text{C}$ ,  $180^{\circ}\text{C}$  oraz  $250^{\circ}\text{C}$ . Następnie przeprowadzono weryfikację przewodnictwa powierzchni otrzymanych filmów metodą elektrochemiczną tj. czteroelektrowa metodą pomiaru przewodnictwa. Substraty stanowiły kwarc, folia poliimidowa(PI) oraz krzem. Wykorzystano również roztwory polianiliny oraz dodatnio naładowanego tlenku grafenu, który modyfikowano aby uzyskać jego dodatnią formę, w celu polepszenia przewodnictwa tworzonych warstw. Poniżej zestawiono przykładowe wyniki pomiarów oporu właściwego, które otrzymano dla filmów polimerowych z wbudowanym zredukowanym tlenkiem grafenu (PEI/rGO) dla różnych substratów.



Rysunek 1 i 2. Zależność oporu właściwego od liczby biwarstw dla filmów kwarc/PEI/rGO oraz PI/PEI/rGO.

Z przeprowadzonych pomiarów przewodnictwa powierzchni wynika, że dla filmów polielektrolit/zredukowany tlenek grafenu maleje opór właściwy wraz ze wzrastającą liczbą biwarstw, czyli wzrasta przewodnictwo. Natomiast filmy polielektrolit/tlenek grafenu nie wykazują właściwości przewodzących.



## 4. Charakterystyka elektrokinetyczna oddziaływań monowarstw HSA rekombinowanego z ligandami jonowymi

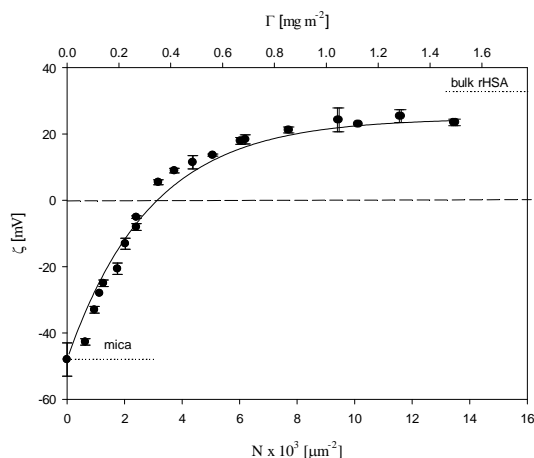
Projekt badawczy "Preludium" NCN 2012/07/N/ST5/02219 [2013-2015]

(doktorant: mgr Marta Kujda, promotor: prof. Zbigniew Adamczyk)

Celem przeprowadzonych badań było określenie właściwości fizykochemicznych i mechanizmów adsorpcji monomeru albuminy rekombinowanej rHSA na substratach hydrofilowych. 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.

W badaniach zastosowano metodę potencjału przepływu w warunkach *in situ*, w fazie ciekłej. Pomiar potencjału przepływu kalibrowano przez zobrazowanie pojedynczych molekuł białka za pomocą techniki mikroskopii AFM. Analizy te pozwoliły na wyznaczenie mechanizmu adsorpcji monomerów rHSA na powierzchni miki w pH 3.5 (Rysunek 1). Ilościowa interpretacja tych pomiarów przeprowadzona została w odniesieniu do teoretycznego modelu elektrokinetycznego 3D. Pozwoliło to na wyznaczenie maksymalnych pokryć białka w warunkach *in situ* z wykorzystaniem technik elektrokinetycznych. W powyższy sposób można skutecznie mierzyć zarówno kinetykę adsorpcji i desorpcji białek charakteryzujących się dowolnym potencjałem zeta. Przeprowadzone pomiary wykazały, że adsorpcja rHSA regulowana jest głównie przez oddziaływania elektrostatyczne. Wartości pokryć maksymalnych nieodwracalnie związanego białka rHSA wynosiły odpowiednio 0,64 do 1,2 mg m<sup>-2</sup> dla sił jonowych 10<sup>-2</sup> M i 0,15 M, pH 3,5. Kolejnym zadaniem badawczym była synteza i oczyszczanie dimeru albuminy ludzkiej z cross-linkerem BMH oraz przeprowadzenie charakterystyki fizykochemicznej uzyskanego preparatu. W powyższym celu przeprowadzono szereg następujących pomiarów:

- wyznaczono stopień czystości preparatu oraz oszacowano masę molową BMH-dimeru 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<sup>-2</sup>-0,15 M, NaCl, dla pH 3.5). Z ruchliwości elektroforetycznej wyznaczono także wartości potencjału zeta.

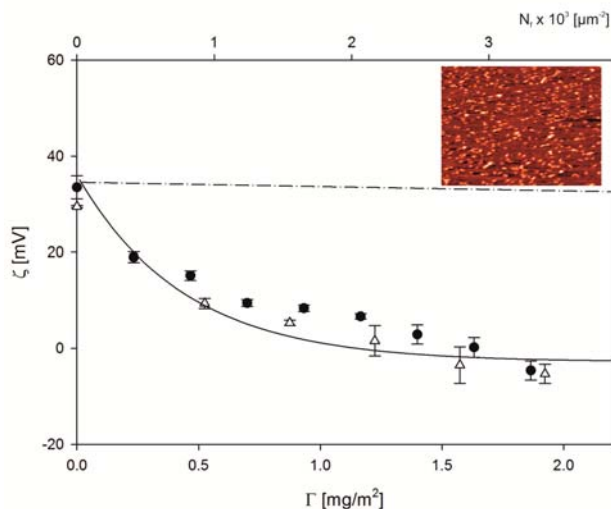


Rysunek 1. Zależność potencjału zeta miki pokrytej cząsteczkami rHSA od liczby cząsteczek białka na  $\mu\text{m}^2$  (oś oś) i od pokrycia  $\Gamma$  [ $\text{mg m}^{-2}$ ] (oś górna), dla siły jonowej 0.01M NaCl i pH 3.5.

## 5. Określenie mechanizmów adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach nośników koloidalnych

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2013/09/N/ST4/00320 [2013-2015]  
(mgr Paulina Żeliszewska, promotor: prof. Zbigniew Adamczyk).

W ramach planowanych prac przeprowadzono obszerną charakterystykę amidynowego lateksu polistyrenowego (o dodatnim ładunku powierzchniowym). Pomiary współczynnika dyfuzji lateksu wykonano przy pomocy techniki DLS dla różnych wartości siły jonowej oraz pH. Równolegle wykonano również pomiary ruchliwości elektroforetycznej, która przy użyciu równania Henry'ego zostały przeliczona na potencjał zeta cząstek lateksowych. Następnym etapem badań była adsorpcja cząsteczek fibrynogenu na cząstkach lateksowych. Proces ten monitorowany był przez badanie zmian ruchliwości elektroforetycznej (potencjału zeta) cząstek lateksowych w zależności od stężenia fibrynogenu. Pomiary wykonano dla pH 7,4 i siły jonowej  $10^{-3}$ ,  $10^{-2}$  oraz 0,15 M NaCl. W tych warunkach cząsteczki fibrynogenu posiadają ujemny ładunek. Dodatkowo przy pomocy mikroskopii AFM wyznaczono maksymalne pokrycie cząstek lateksu cząsteczkami fibrynogenu, a następnie otrzymane wyniki potwierdzono przez porównanie ich z obliczenia teoretycznymi wykonanymi na podstawie modelu RSA. Stabilność monowarstw fibrynogenu na cząstkach lateksowych została sprawdzona przez wykonanie cykli pH, które udowodniły, że nie występują żadne nieodwracalne zmiany w konformacji monowarstwy fibrynogenu. Dodatkowo potencjał zeta monowarstwy okazał się bardziej dodatni niż potencjał zeta czystego roztworu fibrynogenu co świadczy o heterogenicznym rozkładzie ładunku na powierzchni cząsteczek fibrynogenu.



Rysunek 1. Zależność potencjału zeta lateksu od pokrycia fibrynogenem  $\Gamma$  [mg/m<sup>2</sup>] i od stężenia powierzchniowego fibrynogenu  $N_f$  [ $\mu\text{m}^{-2}$ ]( oś górna). Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne obliczone przy zastosowaniu uogólnionego modelu RSA.

## 6. Sprzężenie elektronowe cząsteczki tlenku azotu (II) z centrami kobaltowymi w różnych otoczeniach koordynacyjnych: rola przepływu gęstości elektronowej w aktywacji liganda

Projekt badawczy "Preludium" NCN ST4 [2014-2016]

(doktorant: mgr Adam Stepniewski, promotor: prof. Ewa Broclawik)

Celem badań kwantowo-chemicznych zaplanowanych w projekcie na rok 2014 było określenie przepływu ładunku pomiędzy ligandami donorowymi (cząsteczki amoniaku związane z centrum Co(II) w zeolicie) a układem Co(II)-NO.

W okresie 4 miesięcy od podpisania umowy grantowej określono wybrane czynniki elektronowe istotne dla aktywacji/dezaktywacji NO na centrum kobaltowym przy współdziałaniu amoniaku. Badania obejmowały obliczenia DFT dla małych modeli klastrów. Przebadano wpływ koadsorpcji amoniaku na proces aktywacji NO związanego przez centrum kobaltowe. Przeanalizowano układy zawierające trzy i pięć cząsteczek NH<sub>3</sub>. Pojedynczy tetraedr glinowy (T1) wykorzystano jako przybliżenie otoczenia zeolitowego. Układ z pięcioma cząsteczkami NH<sub>3</sub> rozważano jako niezwiązany z siecią zeolitu.

Wykazano występowanie blisko leżących stanów spinowych dla badanych układów: singletów oraz trypletów. Analiza obliczonych częstości drgań NO wskazuje na znaczącą aktywację NO w wyniku koadsorpcji amoniaku. Cząsteczka NO jest zgięta dla układów z zaadsorbowanym NH<sub>3</sub> (aktywujących) natomiast geometria Co-N-O jest prosta dla układu bez związanego amoniaku (dezaktywującego). Jednakże większa liczba cząsteczek NH<sub>3</sub> oddziałujących z centrum kobaltowym nie jest tożsama z większym przesunięciem częstości drgań NO ku wartościom niższym (red-shift). Singletowy stan spinowy wykazuje większą aktywację NO na centrum kobaltowym modyfikowanym przez sorpcję określonych porcji amoniaku niż stan trypletowy. W badanym przepływie elektronów dominuje przepływ z wolnej pary elektronowej atomów azotu poprzez kobalt (pełniącego rolę przekaźnika elektronów) na orbital antywiązący NO.

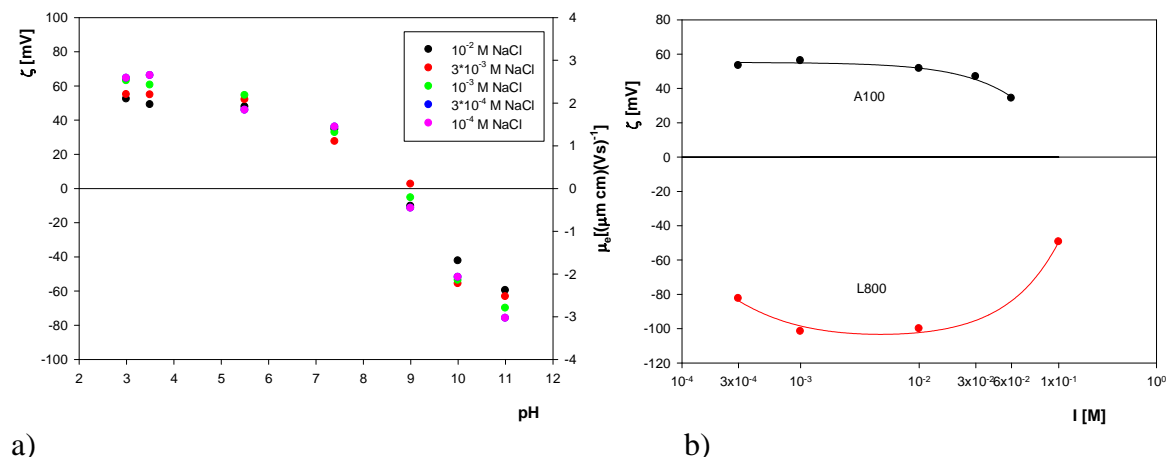
Ważnym wynikiem teoretycznym jest wykazanie roli polaryzacji spinowej w procesach transferu ładunku dla układów adsorpcyjnych kobalt – tlenek azotu przy współobecności amoniaku, co może mieć ogromne znaczenie dla mechanizmu reakcji deNO<sub>x</sub> na centrach metali przejściowych modyfikowanych przez sorpcję ligandów donorowych.

## 7. Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2013/11/N/ST4/00981 [2014-2016]  
(doktorant: mgr Marta Sadowska, promotor: prof. Zbigniew Adamczyk).

W ramach planowanych badań przeprowadzono obszerną charakterystykę fizykochemiczną układów koloidalnych w roztworach elektrolitów. Adsorpcja nanocząstek i białek na powierzchniach mikrocząstek np. na nośnikach koloidalnych jest interesującym zjawiskiem z naukowego punktu widzenia. Określenie mechanizmów adsorpcji ma znaczenie dla optymalizacji przebiegu wielu praktycznych procesów, np. stabilizacji pian czy systemów mikrokapsularnych opartych na układach koloidalnych. Mono- i wielowarstwowe filmy tworzone w nośnikach koloidalnych są także ważnym czynnikiem do produkcji katalizatorów. Np. warstewki hematytu (stabilnego tlenku żelaza) są stosowane jako katalizatory w procesach Habera, a monowarstwy białek (enzymów) na nośnikach koloidalnych są powszechnie używane w procesach katalizy enzymatycznej oraz w testach immunologicznych.

W celu realizacji powyższych zadań wykonano następujące prace badawcze: przeprowadzono syntezę nanocząstek hematytu ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) na podstawie zmodyfikowanej metody Matijevica, opartej na hydrolizie chlorku żelaza w roztworze kwasu solnego oraz przeprowadzono charakterystykę fizykochemiczną nanocząstek oraz nośników koloidalnych dla różnych wartości pH oraz sił jonowych. Przeprowadzono również pomiary ruchliwości elektroforetycznej nanocząstek lateksu amidynowego (A100) o dodatnim ładunku powierzchniowym oraz nanocząstek hematytu wykazujących właściwości amfoteryczne, a także nośników koloidalnych (lateksu polistyrenowego L800 o ujemnym ładunku powierzchniowym). Na podstawie tych pomiarów wyznaczono wartości potencjału zeta stosując równanie Henry'ego w zależności od pH (zmienianego w zakresie 3.0-9.0) oraz siły jonowej zmienianej w zakresie  $10^{-4}$  -  $10^{-2}$  M. Wyniki te są przedstawione na Rysunku 1. Ponadto, przy zastosowaniu metody dynamicznego rozpraszania światła (DLS) wyznaczono zależności wielkości nanocząstek oraz nośników koloidalnych od pH (3.0 - 9.0) i sił jonowych  $10^{-4}$  -  $10^{-2}$  M.



Rysunek 1. Zależność potencjału zeta: a) nanocząstek hematytu w funkcji wartości pH dla różnych sił jonowych b) nanocząstek lateksu A100 i cząstek lateksu L800 w funkcji sił jonowych dla pH 5,5.



## **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 otrzymywane na podłożach monokrystalicznych i polikrystalicznych. Podstawowymi metodami badawczymi w projekcie są wysokorozdzielcze mikroskopie powierzchni: skaningowa mikroskopia tunelowa (STM) oraz mikroskop na elektronach niskoenergetycznych (low energy electron microscopy – LEEM), który wykorzystywany jest w projekcie również jako mikroskop fotoemisyjny (photoemission electron microscopy – PEEM) z wykorzystaniem zarówno źródeł laboratoryjnych, jak i promieniowania synchrotronowego (X-PEEM).

Stosowana metodyka badawcza umożliwi 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.

Kontynuowano badania modelowych katalizatorów na bazie nanocząstek Au na powierzchni magnetytu. Powiązano morfologię oraz dyspersję nanocząstek Au z terminacją powierzchni magnetytu i pokazano, że na powierzchni bogatej w żelazo stabilne są pojedyncze atomy złota, podczas gdy na powierzchni bogatej w tlen występuje tendencja do klasteryzacji.

Badano proces adsorpcji manganu na powierzchni W(110). Pokazano, że struktura warstw manganu zmienia się w sposób istotny z grubością. Dla układów monowarstwowych mangan rośnie pseudomorficznie a wraz z rosnącą grubością wykazuje strukturalne przejście fazowe. Badano też proces odwilżania warstw Mn pod wpływem wygrzewania i stwierdzono, że proces odwilżania przebiega w sposób niejednorodny, zależny od odległości od granicy oddzielającej czystą powierzchnię kryształu W(110) od powierzchni pokrytej manganem.

Kontynuowano badania procesu utleniania powierzchni W(110) z użyciem mikroskopii LEEM. Zobrazowano występowanie dwóch wysokotemperaturowych faz strukturalnych oraz przejście fazowe między nimi.

Na podstawie doświadczeń uzyskanych we współpracy z partnerem szwajcarskim zaprojektowano linię synchrotronową SOLARIS, przy której zainstalowany będzie mikroskop PEEM. Linia pracować będzie na magneście zakrzywiającym w zakresie energii 250-1800 eV, co pozwoli na badanie szerokiej klasy pierwiastków chemicznych począwszy od węgla a skończywszy na metalach 4d. Instalacja linii rozpocznie się na wiosnę 2015, a pierwsze eksperymenty synchrotronowe przewidziane są w końcu roku 2015.





## **PROJEKTY BADAWCZE MNiSW "IUVENTUS PLUS"**



# **1. 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)

W 2014 roku, opracowano metodę syntezy stabilnych zoli srebra bez użycia toksycznych reduktorów i stabilizatorów. Otrzymane suspensje srebra scharakteryzowano w objętości przez wyznaczenie zależności rozmiaru oraz potencjału zeta nanocząstek w funkcji ich stężenia, siły jonowej, pH roztworu oraz czasu. Stabilne suspensje srebra zostały następnie użyte do tworzenia monowarstw o ściśle zdefiniowanym składzie i strukturze.

Kolejnym zagadnieniem badawczym było wyznaczenie kinetyki tworzenia i określenie struktury monowarstw utworzonych przez ujemne nanocząstki srebra oraz dodatnie fluorescencyjne cząstki polistyrenowe na subwarstwie dodatniego poli(chlorku diallilodimetyloamoniowego) (PDADMAC-u) zaadsorbowanej na micy oraz złotej powierzchni sensora QCM. Proces osadzania cząstek odbywał się w warunkach kontrolowanych dyfuzją lub konwekcją.

Stosując technikę grawimetryczną (mikrowaga kwarcowa) i elektrokinetyczną (pomiar potencjału przepływu) oraz AFM, SEM dowiedziono, że monowarstwy srebra o ściśle określonej grubości oraz zdefiniowanym stopniu pokrycia mogą być efektywnie otrzymywane przez dobór odpowiednich warunków prowadzenia procesu adsorpcji tj. użycie nanocząstek srebra o dobrze zdefiniowanym rozmiarze i niskiej polidispersyjności oraz określonego czasu adsorpcji i siły jonowej. Ponadto dowiedziono, że dla krótkich czasów osadzania, < 60 min., przebieg kinetyki osadzania nanocząstek srebra jest liniowy, a następnie rośnie eksponentalnie, wraz z czasem osadzania aż do momentu osiągnięcia maksymalnego stężenia powierzchniowego nanocząstek, np. równego  $N_s = 120 \mu\text{m}^{-2}$  tj. dla siły jonowej  $10^{-3}$  M.

Technika grawimetryczna, elektrokinetyczna, AFM oraz mikroskopia fluorescencyjna zostały również zastosowane do wyznaczenia kinetyki osadzania dodatnich, fluorescencyjnych cząstek polistyrenowych na subwarstwie PDADMAC-u.

Pomiary z użyciem mikrowagi kwarcowej wykazały, że masa, a tym samym ilość osadzonych dodatnich cząstek polistyrenowych maleje w sposób wykładniczy wraz z pokryciem powierzchni dodatnim PDADMAC-iem. Ponadto, wyższe pokrycie powierzchni cząstkami polistyrenowymi uzyskiwano w procesie osadzania z roztworów o niskich siłach jonowych. Spadek pokrycia powierzchni dodatkami cząstkami wraz ze wzrostem pokrycia PDADMAC-iem obserwowano również w komplementarnych pomiarach z użyciem mikroskopii sił atomowych i mikroskopii fluorescencyjnej. Również w pomiarach wykonanych tymi technikami wyższe pokrycie cząstkami uzyskiwano w procesach osadzania cząstek z niższych sił jonowych.

## 2. Zaawansowane badania teoretyczne nad reakcją mutarotacji D-glukopiranozy

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

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

### Modelowanie molekularne reakcji mutarotacji glukozy: zbieranie trajektorii reaktywnych

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 projektu przeprowadzono 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 metody DFT; pozostała część - klasycznej mechaniki molekularnej (model wody TIP3P dla reszty środowiska wodnego oraz pole siłowe CHARMM dla cząsteczki glukozy).

Opisywany etap badań obejmował wygenerowanie startowych trajektorii "reaktywnych", tj. takich, które łączą predefiniowane stany: początkowy (cząsteczka glukozy w formie cyklicznej) i końcowy (glukoza w postaci aldehydu). Startowe trajektorie te wygenerowane były przy użyciu więzów odległościowych nakładanych na wybrane pary atomów. Pomimo testowania różnego rodzaju więzów jak również różnych konfiguracji układu (obejmujących np. różne ułożenie cząsteczek wody otaczającej cząsteczkę glukozy) możliwe było uzyskanie trajektorii reaktywnych dwóch różnych typów. Różnią się one ilością cząsteczek wody (1 lub 2) biorących udział w reakcji rozrywania pierścienia.

Powyższe początkowe trajektorie zostały użyte w procedurze *transition path sampling* (TPS) do wygenerowania dalszych trajektorii reaktywnych, bez użycia jakichkolwiek więzów. Procedurę zastosowano oddzielnie dla  $\alpha$ - i  $\beta$ -D-glukopiranozy; łącznie, we wszystkich czterech przypadkach (dwa możliwe mechanizmy dla dwóch układów) wygenerowano ponad 400 trajektorii. Trajektorie TPS zostaną poddane szczegółowej analizie w ramach dalszych zadań badawczych.

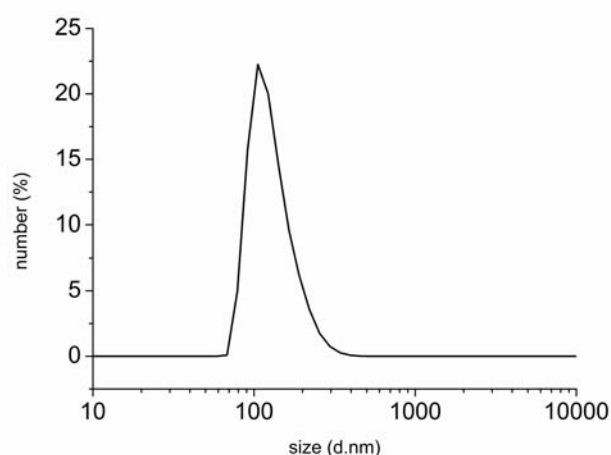
### 3. Magnetyczne systemy dostarczania leków z możliwością sterowanego uwalniania czynnika aktywnego

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 nanonośników 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 2014 roku skupiono się na zadaniu projektu dotyczącym wbudowania wybranych nanocząstek (magnetytu lub złota) do powłoki nanokapsułki co pozwoli na otrzymanie nanokapsułek reagujących na bodźce zewnętrzne pozwalające sterować uwalnianiem czynnika aktywnego. Nanokapsułki otrzymywano metodą opracowaną w naszym instytucie, tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych, tzw. metodą "warstwa po warstwie". Nanocząstki złota lub magnetytu zostały użyte jako jedna z warstw w powłoce polielektrolitowej. Otrzymano nanokapsułki o średnim rozmiarze 100 nm. Na Rysunku 1 możemy zaobserwować rozkład wielkości otrzymanych nanokapsułek mierzony techniką DLS.



Rysunek 1. Rozkład wielkości otrzymanych nanokapsułek



## **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 roku 2014 realizowano i zakończono poszczególne zadania badawcze, zgodnie z zaplanowanym harmonogramem projektu.

1. Zakończono preparatykę katalizatorów zawierających aktywną fazę Cu - Ag naniesioną metodą impregnacji na nośniki tlenkowe o różnym charakterze ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  i  $\text{MgO}$ ); zawartość miedzi wynosi 2-6 mmol/1g nośnika, w przypadku katalizatorów bimetalicznych zawartości miedzi i srebra wynoszą 0-1,5mmol metalu/1g nośnika. Obróbka termiczna katalizatorów obejmowała suszenie w  $120^\circ\text{C}$  - 10h i prażenie w  $350^\circ\text{C}$  - 5h w przepływie powietrza.
2. Wykonano charakterystykę fizykochemiczną zsyntetyzowanych katalizatorów serii Cu-Ag/tlenek metalu ( $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MgO}$ ) - obejmującą określenie struktury i tekstury metodami BET, XRD, składu chemicznego (XRF), właściwości redukująco-utleniających za pomocą pomiarów  $\text{H}_2\text{TPR}$  oraz właściwości kwasowo-zasadowych przy użyciu spektroskopii IR (dla wybranych preparatów).
3. Kontynuowano i zakończono testy katalityczne zsyntetyzowanych katalizatorów serii Ag-Cu/nośnik tlenkowy w reakcji hydrogenolizy glicerolu wg zmodyfikowanych warunków: wstępnej redukcji ( $T = 200^\circ\text{C}$ ,  $p_{\text{H}_2} = 5 \text{ atm.}$ ,  $t = 2 \text{ h}$ , 100 obr./min.) i reakcji hydrogenolizy glicerolu ( $T = 200^\circ\text{C}$ ,  $p_{\text{H}_2} = 40 \text{ atm.}$ ,  $t = 24 \text{ h}$ , 400 obr./min.). Katalizatory serii Cu-Ag/ $\text{TiO}_2$  są bardziej aktywne w badanej reakcji niż ich odpowiedniki na nośniku  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Konwersje glicerolu dla próbek Cu-Ag/ $\text{TiO}_2$  mają wartości w przedziale 24-47%; dla katalizatorów Cu-Ag/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  najwyższe konwersje glicerolu nie przekraczają 38%. Zaobserwowano ponadto wpływ zastosowanego nośnika na rodzaju ilości otrzymywanych w testowanej reakcji produktów. Dla katalizatorów na nośniku  $\text{Al}_2\text{O}_3$  głównym produktem reakcji jest 1,2- propandiol (najwyższa selektywność około 70%); dla nośnika  $\text{TiO}_2$  w produktach reakcji dominują 1-propanol (selektywności 30-64%) i acetol (selektywności 2-19%); selektywności do 1,2-propandiolu są poniżej 15%. Katalizatory zawierające tylko srebro ( $2\text{Ag}/\text{Al}_2\text{O}_3$  i  $2\text{Ag}/\text{TiO}_2$ ) są najmniej aktywne w reakcji hydrogenolizy glicerolu; konwersje glicerolu wynoszą odpowiednio 15% i 24%. Dla obydwu w/w próbek głównym produktem reakcji jest 1-propanol (dla  $2\text{Ag}/\text{Al}_2\text{O}_3$   $S_{1\text{-propanolu}} = 90\%$ ); selektywności do 1,2-propandiolu są niewielkie. Wyniki te jednoznacznie wskazują, że zdyspergowana na nośniku tlenkowym miedź jest znacznie bardziej aktywnymi selektywnym do pożądanego 1,2-propandiolu katalizatorem reakcji hydrogenolizy glicerolu niż samo srebro i układ bimetaliczny Cu-Ag.
4. Drugi stypendysta projektu obronił w 2014 roku na Akademii Górniczo-Hutniczej pracę magisterską "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne układów CuO/chromit metalu dwuwartościowego do reakcji hydrogenolizy glicerolu" (z wynikiem bardzo dobrym).



## **PROJEKTY STRATEGICZNE NCBiR**



# 1. NUCLEAR 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 NUCLEAR SP/J/7/170071/12 [2012-2015]

(kierownik projektu: prof. Alicja Drelinkiewicz)

Celem badań jest określenie 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.

Realizowane prace obejmowały badanie 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.

Wykonane badania koncentrowały się na określeniu roli rodzaju nośnika ( $Al_2O_3$ ,  $SiO_2$ ,  $MoO_3$ ,  $WO_3$ , montmorylonity Al, Al-Zr, Zr) oraz rodzaju metalu (Pt, Pd, Pd-Pt, Pd-Au) na aktywność i stabilność pracy katalizatorów w mieszaninie reakcyjnej zawierającej wilgoć.

Uzyskane wyniki dotyczą następujących zagadnień

- synteza katalizatorów z zastosowaniem różnych nośników,
- 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 z zastosowaniem mieszaniny reakcyjnej 0.5 %  $H_2$  w powietrzu, wysycanej parą wodną w temp.  $25^{\circ}C$ ,
- określenie metodą mikrokalorymetrii przepływowej (Microscal) efektu termicznego reakcji rekombinacji wodoru i tlenu oraz stabilności katalizatorów,
- obliczenia metoda DFT oddziaływań elektronowych w układach cząsteczka  $H_2O$  – klaster metalu  $M_{2-26}$  (M = Pd, Pt, Pd-Pt).

Pomiary aktywności w reaktorze przepływowym pokazały, że zarówno rodzaj nośnika, jak i metalu wpływają na dezaktywację katalizatorów spowodowaną obecnością wilgoci w mieszaninie reakcyjnej. Największej dezaktywacji ulegały katalizatory zawierające  $Al_2O_3$  oraz Pt. Dezaktywacja była znacznie mniejsza dla katalizatorów Pd. Najlepsze wyniki uzyskano dla katalizatorów bimetalicznych Pd-Pt, jednakże ich zachowanie warunkowane było stosunkiem Pt/Pd. Preparaty bogate w Pt (Pt/Pd=2) ulegały, podobnie jak Pt silniejszej dezaktywacji. Efekty te znalazły potwierdzenie w pomiarach mikrokalorymetrycznych, które dostarczyły wyniki dotyczące stabilności katalizatorów w stosunku do wody tworzonej w reakcji. Obliczenia metodą DFT potwierdziły słabsze oddziaływanie klasterów Pd z cząsteczkami wody niż w układach zawierających klastery Pt.

Uzyskanych wyniki mogą być wykorzystane przy wyborze katalizatorów dla reaktorów PAR.



## **PROJEKTY BADAŃ STOSOWANYCH NCBiR**





# 1. HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych



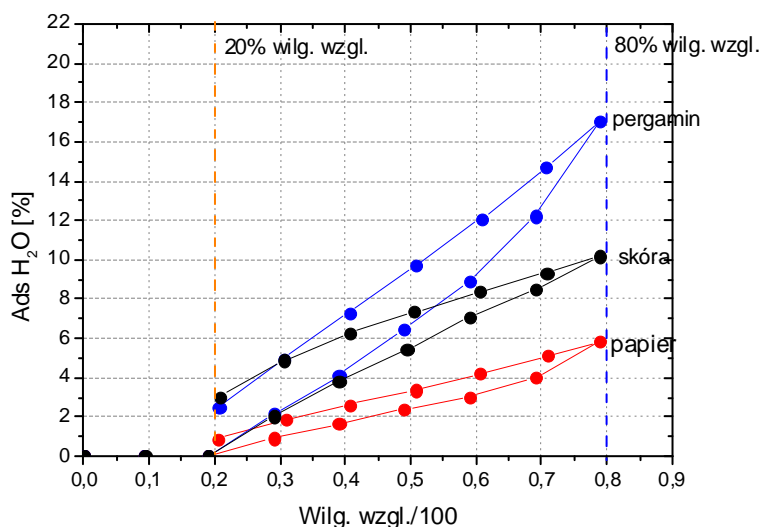
Program Badań Stosowanych NCBiR HERIVERDE PBS2/A9/24/2013  
[2013-2016]

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<sup>®</sup> Plus umożliwiającego bardziej precyzyjne modelowanie mikroklimatu i zużycia energii w muzeach, bibliotekach i archiwach.

Głównym zadaniem Instytutu w projekcie jest modelowanie transportu pary wodnej, odkształceń i naprężeń w różnych 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 uszkodzenia obiektów.

Znacznie zaawansowano program pomiarów adsorpcji pary wodnej oraz wilgotnościowej odpowiedzi wymiarowej materiałów wchodzących w skład obiektów bibliotecznych. Na ich podstawie ustalono średnie izotermy adsorpcji pary wodnej dla historycznego papieru - zarówno czerpanego, jak i XIX-wiecznych papierów maszynowych, pergaminu oraz zabytkowych skórzanych opraw książkowych.



Rysunek 1 Porównanie średnich izoterm adsorpcji pary wodnej materiałów wchodzących w skład obiektów bibliotecznych w rzeczywistym dla bibliotek i muzeów zakresie 20-80% wilgotności względnej

Badania pokazały, że pergamin jest najbardziej wrażliwym materiałem na zmiany klimatyczne w otoczeniu, stąd dopuszczalne poziomy i fluktuacje parametrów temperatury i wilgotności względnej będą ustalane w planowanym projekcie na podstawie analizy nieodwracalnej deformacji (pofalowania i pomarszczenia) kart pergaminowych, jako studium najgorszego przypadku w kontekście mieszanych zbiorów bibliotecznych i archiwalnych. Przyjęte kryterium zagrożenia tych zbiorów uszkodzeniami fizycznymi zostanie użyte do obliczania wskaźników zagrożeń przez opracowywane w projekcie oprogramowanie.



## **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 2014 kontynuowano zadanie 2, tj. opracowanie systemu nadekspresji S25DH w komórkach *E. coli* oraz pracę nad optymalizacją układu reakcyjnego (zadania 4 i 5). Ponadto rozpoczęto badania nad metodami immobilizacji enzymu (zadanie 6) oraz nad zwiększeniem skali syntezy (zadanie 7).

W celu otrzymania systemu nadekspresji S25DH geny kodujące poszczególne podjednostki enzymu zostały wklonowane w różne wektory ekspresyjne. Proces optymalizacji procedury polegał na sprawdzeniu czy skład podjednostkowy i kolejność podjednostek w tworzonym wektorze mają znaczenie na wydajność ekspresji. Nadekspresja prowadzona była w komórkach *E. coli* w warunkach beztlenowych. Enzym oczyszczany był wykorzystując powinowactwo metki Strep-tag do złoża StrepTactin. Obecność enzymu we frakcjach była testowana metodą SDS-PAGE. Wydajność ekspresji podjednostki  $\alpha$  była dobra, natomiast podjednostki  $\beta$  i  $\gamma$  nie były wykrywane w analizach. Testy kinetyczne były drugim sposobem weryfikacji, czy w danej procedurze ekspresji i oczyszczania białka otrzymywany jest aktywny enzym. W tym celu lizat komórek *E. coli* inkubowany był z substratem enzymu 4-cholesten-3-onem. Reakcje prowadzone były w warunkach tlenowych i beztlenowych, a ich przebieg monitorowany był w analizach HPLC. Nie zaobserwowano produktu działania rekombinowanego S25DH, stąd protokół otrzymywania S25DH wymaga dalszej optymalizacji.

W ramach optymalizacji układu reakcyjnego przeprowadzono testy głównie z wykorzystaniem enzymu homogenicznego. Ze względu na wysoką cenę stosowanego obecnie solubilizatora (cyklodekstryny) przebadano szereg innych potencjalnych związków tj. surfaktantów (w zakresie stężeń od 0.1% do 10% g/obj.) oraz rozpuszczalników organicznych. Do sprawdzenia efektywności modyfikacji warunków wykorzystywano test aktywności z natywnym substratem enzymu, cholest-4-en-3-onem. Mierzona aktywność był wypadkowym efektem zwiększenia dostępności substratu oraz wpływu dodatkowych czynników na sam enzym. Badania wykazały na zdecydowaną przewagę cyklodekstryny nad innymi solubilizatorami oraz na wysoką odporność operacyjną enzymu na wybrane rozpuszczalniki organiczne. Ponadto przebadano wpływ stężenia akceptora elektronowego na wydajność w syntezie w reaktorze okresowym, co pozwoliło ustalić optymalne stężenia operacyjne. Przebadano również potencjalną przydatność odtwarzania elektrochemicznego akceptora elektronowego w reaktorze okresowym.

Przeprowadzono również szeroko zakrojone badania przesiewowe w celu identyfikacji najlepszego nośnika do immobilizacji S25DH. Przebadano nośniki mikrocelulozowe, modyfikowane powierzchniowo krzemionki (typu SBA i MCF) oraz modyfikowane nośniki polimerowe typu Sepharose czy Eupergit. Otrzymane preparaty przebadano w reaktorach okresowych z zasilaniem i porównano wydajność syntezy z katalizatorem homogenicznym w analogicznym układzie reakcyjnym.



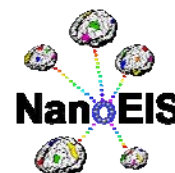
## **PROJEKTY 7. PROGRAMU RAMOWEGO UE**





# 1. 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 "Horyzont 2020", stwarzając poważne wyzwania w stosunku do edukacji i upowszechniania wiedzy w zakresie nanonauki i nanotechnologii. Potrzeba zatem ewaluacji istniejącego systemu nauczania w dziedzinie nanotechnologii. 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.

Przeanalizowane w ramach projektu uniwersyteckie programy nauczania kładą nacisk na klasyczne przedmioty. Na pierwszej pozycji plasują się charakterystyka/metrologia, tuż potem nanoelektronika i nanostruktury/kompozyty. Tematy związane ze zdrowiem i bezpieczeństwem, stanowiące zagadnienia priorytetowe dla pracodawców, pojawiają się zaledwie wśród połowy przebadanych programów nauczania (17/35). Siedem programów obejmuje nauczanie podstaw prawnych i regulacji dotyczących nanomateriałów, podczas gdy żaden z analizowanych programów nie porusza obszaru zagadnień związanych z oddziaływaniem nanomateriałów na środowisko, ich składowaniem i recyklingiem.

Zbadano ponadto, jakie działania ze strony uczelni wyższych mogą ułatwić wejście absolwentów kierunku nanotechnologia na rynek pracy. Przeprowadzone badania dowodzą, że jest to związane wyłącznie z zaangażowaniem sektora przemysłowego w proces kształcenia.

Inna forma udziału przemysłu, np. poprzez zasiadanie ich przedstawicieli w radach programowych (często uznawane za rozwiązanie modelowe) nie przynosi zauważalnego wpływu na ilość liczbę absolwentów zatrudnianych w sektorze nanotechnologii.

Porównanie oczekiwań pracodawców z ofertą uczelni pokazuje znaczący rozdzźwięk. Z jednej strony, wysoko wykwalifikowani absolwenci mogą nie znaleźć zatrudnienia w przemyśle, który z kolei bezskutecznie poszukuje pracowników wyposażonych w specyficzne umiejętności. W celu lepszego dopasowania ofert uczelni do potrzeb pracodawców, modelowy program nauczania na kierunku nanotechnologia, tworzony w ramach niniejszego projektu, powinien nie tylko zawierać klasyczne przedmioty nauczane na uniwersytetach, lecz również dawać umiejętności i wiedzę spodziewane przez pracodawców. Proponowany sylabus szczególnie nacisk kładzie zatem na zagadnienia z następujących dziedzin: zdrowie, bezpieczeństwo, regulacje prawne, środowisko, zagospodarowanie nanomateriałów i ich recykling. Proponuje się, że absolwent studiów 1. stopnia będzie posiadał ugruntowaną wiedzę z podstaw chemii, fizyki i biologii, jak również podstaw nanotechnologii. Powinien być w stanie prowadzić podstawowe badania i analizy przy użyciu nowoczesnych narzędzi i metod badawczych. Absolwent studiów 2. stopnia powinien być przygotowany aby rozwiązywać interdyscyplinarne problemy typowe dla sektora nanotechnologii, umieć korzystać z informacji naukowych i porozumiewać się w języku obcym. Absolwent studiów 3. stopnia powinien natomiast być w pełni kompetentnym badaczem.

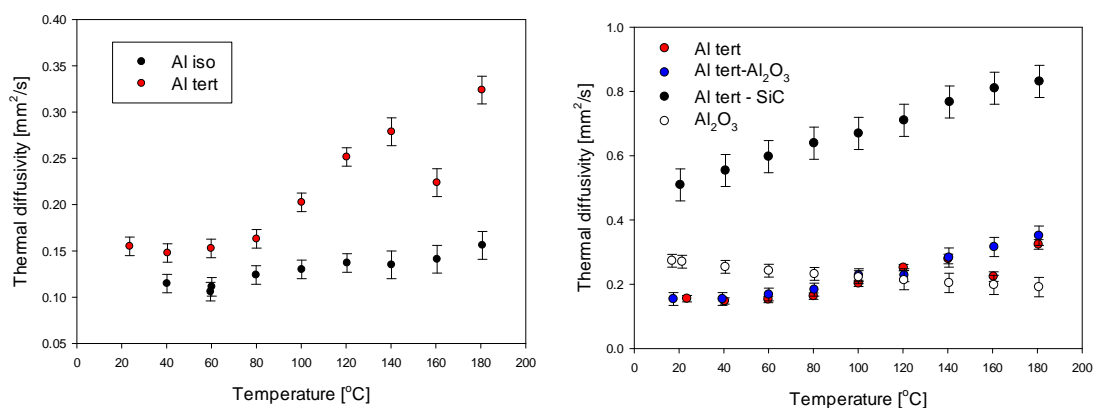
## 4. HYPERCONNECT Functional Joining of Dissimilar Materials Using Directed Self-assembly of Nanoparticles by Capillary-Bridging

Projekt EC 7<sup>th</sup> 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.

Ideą projektu jest opracowanie nowatorskiej metodologii łączenia elementów mikroukładów elektronicznych za pomocą materiałów o wysokiej przewodności elektrycznej, termicznej oraz dobrych właściwościach termomechanicznych. Koncepcja projektu zakłada stworzenie nowych funkcjonalnych połączeń pomiędzy różnymi materiałami kompozytowymi. Mają one postać mostków kapilarnych (szybki z nanocząstek) utworzonych pomiędzy mikrocząstkami. Projekt jest realizowany przez konsorcjum, w którym uczestniczy pięć jednostek naukowych Fraunhofer-Gesellschaft (Niemcy), SINTEF (Norwegia), IkiFP PAN (Polska), Technische Universität Chemnitz (Niemcy), Stiftinga Vestlandforskning (Norwegia) oraz pięciu partnerów przemysłowych: IBM Research GMBH (Szwajcaria), LORD (Niemcy), Intrinsic Materials Ltd. (Wielka Brytania), Angewandte Micro-Messtechnik (Niemcy), Conpart AS (Norwegia).

Prace koncentrowały się na rozwinięciu technologii tworzenia mostków kapilarnych  $Al_2O_3$  metodą zol-żel. Mostki były tworzone pomiędzy modelowymi mikrosferami tlenku aluminium używając izopropanolanu lub tertbutanolan glinu jako prekursora. W następnym etapie do roztworu prekursora wprowadzano nanocząstki wubraných materiałów o wysokim przewodnictwie cieplnym lub elektrycznym (SiC,  $Al_2O_3$ , Cu, grafen) i badano przebieg formowania mostków kapilarnych w takich układach. Alternatywnie używano polimeru (PEI) jako lepiszcza dla mostków kapilarnych tworzonych z ww. nanocząstek. Metoda "laser-flash" analizowano dyfuzyjność termiczną materiałów  $Al_2O_3$  uzyskanych metodą zol-żel bez lub z dodatkiem nanocząstek. Stwierdzono, że materiały uzyskane z prekursora tertbutanolanu glinu charakteryzują się wyższą dyfuzyjnością termiczną w stosunku do uzyskanych z izopropanolanu glinu a dodatek nanocząstek SiC dodatkowo podwyższa wartość dyfuzyjności. Rysunek 1 ilustruje uzyskane wyniki.



Rysunek 1. Dyfuzyjność termiczna materiałów  $Al_2O_3$  otrzymanych metoda zol-żel

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 2014 roku zorganizowano szereg spotkań w ramach Grup Roboczych (WG): WG2&5, "Colloidal Interactions", Berlin; WG1,3,5,6, "Particles at Liquid Interfaces: Industrial, environmental and bio-medical aspects", Genua; WG 3&4 Meeting "Synthesis of advanced nano- and bio-colloidal materials with highly active surfaces", Belgrad, WG 1-6 Meeting "Polymer+Surfactant Self-Assembly: Formulations, Deposition and Nanoparticle Formation", Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra. Doroczną konferencję Akcji CM1101 zorganizowano w połączeniu z konferencją ECIS 2014 w Limassol. Wspólną Szkołą Akcji CM1101 oraz MP1106 zorganizowano w Bonassola, doroczną Szkołą CM1101 "Interfacial Engineering: Fundamentals, Applications, and Analytical Methods" w Delft, a 12<sup>th</sup> European Summer School on "Scattering Methods Applied to Soft Condensed Matter" w Carcans-Maubuisson. Dodatkowo zorganizowano 16 krótkich staży dla naukowców.

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



## 2. ECOSTBio Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry

Projekt EU COST Action CM1305 ECOSTBio [2012-2016]

(koordynator krajowy: *prof. Ewa Brocławik*)

Akcja ECOSTBio służy powołaniu sieci grup badawczych, zarówno eksperymentalnych jak i doświadczalnych pracujących nad problemami chemicznymi, w których spin odgrywa ważną rolę. Głównym celem jest stworzenie bazy danych SPINSTATE gdzie będą umieszczone układy o poznanych stanach spinowych oraz ich właściwości. Współpraca teoretyków i doświadczalników powinna doprowadzić do efektów synergetycznych, przez wspomaganie teoretyków (sprawdzanie tworzonych modeli) jak i doświadczalników (poprawa właściwości nowych materiałów o pożądanym właściwościach

Pierwsze spotkanie organizacyjne miało miejsce w Brukseli 24 kwietnia 2014 roku. Prezentacja wszystkich uczestników odbyła się w formie dyskusji okrągłego stołu. Delegaci przedstawili w skrócie zaplecze profesjonalne, obecne były reprezentacje 25 krajów: Austria, Belgia, Czechy, Dania, Francja, Niemcy, Grecja, Węgry, Irlandia, Izrael, Holandia, Norwegia, Polska, Portugalia, Rumunia, Serbia, Hiszpania and Wielka Brytania. Przedstawicielem Polski jako koordynator krajowy jest prof. Ewa Brocławik, zastępcą jest dr hab. Tomasz Borowski prof IKiFP. Powołano cztery grupy robocze: WG1 – baza danych SPINSTATE, WG2 - Enzymatyczne stany spinowe, WG3 - Spin crossover oraz WG4 - Biomimetyczne stany spinowe.

Pierwsze warsztaty naukowe oraz spotkanie Management Committee odbyło się 22-23 września w Gironie Pierwszego dnia odbyła się sesja "Let's Get to Know Each Other", gdzie wszystkie grupy uczestniczące przedstawiały siebie, swoje badania oraz ekspertyzę i zainteresowania (Polska była reprezentowana przez E. Brocławik). Drugi dzień obejmował prezentacje naukowe (Instytut Katalizy był reprezentowany przez referat T. Borowskiego).

### 3. PoCheMoN Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience



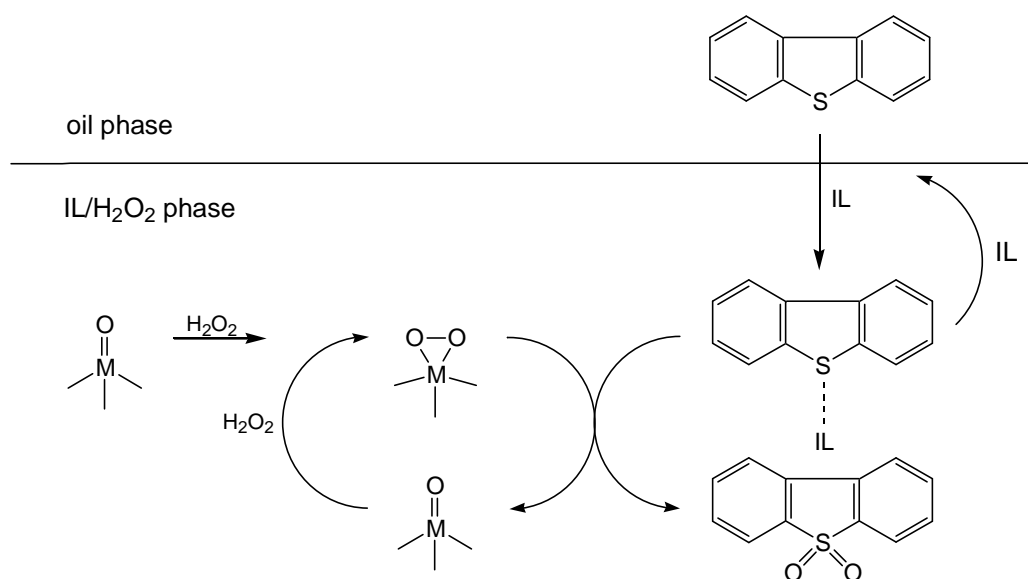
Projekt EU COST Action CM1203 PoCheMoN [2012-2016]

(przedstawiciel: prof. Bogdan Sulikowski)

#### Utleniająca desulfuryzacja węglowodorów parafinowych przy użyciu specjalnych cieczy jonowych

(prof. Bogdan Sulikowski, dr hab. Janusz Nowicki, dr Urszula Filek)

W okresie sprawozdawczym prowadzono prace w zakresie utleniającej desulfuryzacji węglowodorów parafinowych przy użyciu specjalnych cieczy jonowych. Prace wstępne wykonywano dla układu przedstawionego na poniższym schemacie:



Jako katalizatorów używano następujących prekursorów POM -  $\text{H}_2\text{WO}_4$  i  $\text{H}_2\text{MoO}_4$ .

Stosowano ciecze jonowe  $\text{bmimBF}_4$  oraz  $\text{bmimOTf}$ .

We wstępnych eksperymentach uzyskano wysoki poziom desulfuryzacji, bliski 100%.

Najbliższe plany badawcze przewidują wykonanie następujących prac:

1. użycie zwykłych POM's (fosforomolibdenowych, fosforowolframowych) jako mediów transferu tlenu,
2. użycie cieczy jonowych typu  $\text{C}_n\text{mimX}$  (amphiphilic IL) i zbadanie wpływu długości łańcucha węglowego na efektywność desulfuryzacji. Proces desulfuryzacji będzie prowadzony w emulsji.





#### **4. SGI Smart and Green Interfaces - from Single Bubbles and Drops to Industrial, Environmental and Biomedical Applications**

Projekt EU COST Action MP1106 SGI [2012-2016]  
(koordynator krajowy: *prof. Kazimierz Małysa*)

W pracach grantu COST MP1106 "Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)" uczestniczą zespoły badawcze z 31 krajów, a koordynatorem projektu jest prof. Thodoris Karapantsios z Aristotle University of Thessaloniki. Prof. K. Małysa jest polskim przedstawicielem w Management Committee COST MP1106 realizowanego w okresie od 11.05.2012 do 10.05.2016.

W ramach tzw. Short Term Scientific Mission (STSM), finansowanych ze środków grantu COST MP1106 przebywała w naszym Instytucie w okresie 02-21.06.2014 dr A. Gyurova z Rostislav Kaischew Institute of Physical Chemistry Bulgarian Academy of Sciences, Sofia. Dr Gyurova wykonywała w naszym Instytucie badania dotyczące: "Dynamic light scattering study DLS of aqueous solutions of antennary oligoglycines with potential biomedical applications".

Dr Marcel Krzan aplikował i otrzymał w 2014 r. finansowanie z projektu COST MP 1106 na wyjazd naukowy (STSM) do CNR-Instituto per l'Energetica e le Interfasi (CNR-IENI) w Genewie, gdzie przebywał w okresie 24.11-5.12.2014. W trakcie pobytu w CNR-IENI dr Krzan wykonywał badania dotyczące "Dynamic properties of mixed nanoparticle / biosurfactant adsorption layers".

**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 neuroprotektynym do uszkodzonego obszaru mózgowia.

Głównym celem projektu NanoNeucar jest opracowanie nowej strategii dostarczania leków o działaniu neuroprotektynym przy pomocy nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, a zarazem nie wykazujących negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie. Projekt realizowany jest przez konsorcjum naukowe, w którego skład wchodzi trzy instytucje polskie: IkiFP 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

W 2014 roku w IkiFP PAN skupiono się na preparatyce nanokapsułek zawierających hydrofobowe leki neuroprotektynne (polidatynę, kurkuminę) oraz na zbadaniu aktywności neuroprotektynnej wytworzonych preparatów. Nanokapsułki otrzymano metodą opracowaną w naszym laboratorium, tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych. Polielektrolitowe powłoki multiwarstwowe tworzono metodą sekwencyjnej adsorpcji polielektrolitów (metoda warstwa po warstwie), techniką saturacyjną. Do budowy powłok polielektrolitowych użyto biokompatybilnych oraz biodegradowalnych polielektrolitów poli(L-Lizyny) jako polikationu oraz poli(kwasu glutaminowego) jako polianionu. Otrzymano nanokapsułki o średnim rozmiarze 80 nm zawierające polidatynę i kurkuminę. Prowadzono również prace mające na celu otrzymanie nanonośników na bazie mikroemulsji otrzymywanych metodą odwrócenia faz. Otrzymane nanokapsułki zawierające leki neuroprotektynne zostały przekazane partnerom konsorcjum do dalszych badań.



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

Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej /210445/53/2013 FUNCLAY (small grant) [2013-2015]

(kierownik projektu: dr Małgorzata Zimowska)

Celem projektu była funkcjonalizacja krzemionkowych nośników kompozytowych, otrzymanych na podstawie syntetycznego minerału warstwowego z grupy smektytów – Laponicie oraz utworzonej pomiędzy jego pakietami mezoporowatej, amorficznej krzemionki. Badania opierały się na opracowaniu nowej, selektywnej i kierunkowej (site selected) metody wprowadzania heteroatomów z bloku d do struktury porowatych heterostruktur ilastych typu PCH. Funkcjonalizację nanohybrydowych kompozytów wykonano metodą post-syntezy impregnacji wodnymi roztworami zawierającymi Fe. Zastosowano dwie formy źródła żelaza - organiczną  $C_6H_5FeO$  i nieorganiczną  $(FeNO_3)_3 \cdot 9H_2O$ .

W celu selektywnego doboru miejsca wprowadzenia heteroatomu w strukturę ilastego kompozytu zastosowano metodę temperaturowej transformacji w środowisku utleniającym i redukującym, traktowanie w środowisku wodnym pod wysokim ciśnieniem oraz traktowanie mikrofalami. W wyniku zastosowanych metod otrzymano funkcjonalizowane nanohybrydowe kompozyty zawierające Fe o stosunku Si/Fe = 10.

W ramach projektu zbadano właściwości fizykochemiczne: parametry strukturalne i teksturalne, kwasowość oraz skład badanych funkcjonalizowanych, hybrydowych nanostruktur ilastych metodami XRF, XRD, SEM,  $NH_3$  TPD, adsorpcji/desorpcji  $N_2$ . Miejsce wprowadzenia żelaza, możliwe zmiany w koordynacji oraz stopniu utlenienia zachodzące podczas syntezy oraz zmiany strukturalne kompozytu określono z zastosowaniem metod spektroskopii Mössbauera,  $^{29}Si$  MAS NMR oraz spektroskopii FTIR w zakresie średnim MIR i bliskim NIR. Wpływ funkcjonalizacji porowatych heterostruktur ilastych na aktywność katalityczną zweryfikowano w reakcji dekompozycji etanolu w atmosferze powietrza.

Analiza elementarna potwierdziła wprowadzenie Fe w strukturę kompozytu PCH. Badania spektroskopowe IR funkcjonalizowanych hybrydowych nanostruktur ilastych, wykazały wbudowanie Fe w sieć amorficznej krzemionki – składowej powstałej podczas syntezy PCH oraz stabilność warstw tetraedrycznych Laponitu, nieznacznie zaburzonej po zastosowaniu wysokiego ciśnienia.

Temperaturowe traktowanie kompozytu PCH impregnowanego wodnym roztworem  $(FeNO_3)_3 \cdot 9H_2O$ , spowodowało wprowadzenie ok. 60% Fe w strukturę nośnika w postaci dwóch form o koordynacji tetraedrycznej, nieznacznie różniących się otoczeniem – o wysokiej symetrii (bulk type) oraz niskiej symetrii (sub-surface type). Zastosowanie mikrofal oraz wysokiego ciśnienia skutkowało ok. 70% a nawet 98% inkorporacją Fe w sieć nośnika. Pozostała część Fe związana była z utworzeniem pozasieciowych form magnetycznego tlenku żelaza, tworzącego odrębną fazę. Impregnacja kompozytu formą organiczną  $C_6H_5FeO$  skutkowała wzrostem ilości żelaza tetraedrycznego w sieci PCH, a po zastosowaniu preparatyki wysokociśnieniowej, jego całkowitym wbudowaniem w warstwy przypowierzchniowe, o czym świadczy także całkowity zanik drgań Si-OH na widmach NIR-IR.

### 3. InLinePV In-line processing of n<sup>+</sup>/p and p/p<sup>+</sup> junction systems for cheap photovoltaic module production



Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej

ID 199380 InLinePV (core) [2014-2016]

(koordynator: prof. Piotr Warszyński, główny wykonawca: dr Robert Socha)

Koszty produkcji modułów fotowoltaicznych ograniczają ich wykorzystanie jako źródeł energii elektrycznej w życiu codziennym. Wytwarzanie złącz n<sup>+</sup>/p i p/p<sup>+</sup> na oddzielnych etapach tworzy dodatkowe koszty, które mogą zostać obniżone w przypadku zastosowania procesów taśmowych. Celem projektu InLinePV jest opracowanie prostych, obojętnych dla środowiska i tanich metod dotowania krzemu, aby wytworzyć konieczne złącza.

Partnerami zewnętrznymi projektu są SINTEF Materials and Chemistry oraz Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN. Współpraca bilateralna między partnerami konsorcjum jest ukierunkowana na wymianę doświadczeń naukowo-badawczych oraz technologicznych w obszarze stosowalności projektu w celu poszerzenia możliwości technicznych i wykonawczych zaangażowanych instytucji.

Partnerzy projektu pracują nad opracowaniem nowej technologii tworzenia złącz n<sup>+</sup>/p i p/p<sup>+</sup> na krzemie, które to złącza są konieczne do wystąpienia zjawiska fotoelektrycznego będącego podstawą dla działania ogniw fotowoltaicznych. Dotowanie krzemu fosforem, jako składnikiem złącza, jest wykonywane z obojętnych dla środowiska ciekłych źródeł w przeciwieństwie do toksycznego i gazowego PClO<sub>3</sub> znajdującego zastosowanie w przemyśle. Wysiłek badawczy koncentruje się na przystosowaniu procesu dotowania fosforem do taśmowych procesów wytwarzania modułów fotowoltaicznych, co powinno skutkować obniżeniem kosztów produkcji modułów.

Dodatkowo, osiągnięcie niskiej reflektancji powierzchni krzemu jest istotne z uwagi na konieczność efektywnej absorpcji światła, co prowadzi do podwyższenia sprawności ogniw fotowoltaicznych. Jedną z dróg podwyższenia absorpcji światła jest teksturyzacja powierzchni krzemu metodą trawienia powierzchniowego. Trawienie w obecności metalu (metal assisted etching - MAE), gdzie cząstka metaliczna jest katalizatorem działającym w miejscu styku z krzemem, może być zastosowane w tym celu. W projekcie badano trawienie krzemu metodą MAE przy udziale katalizatorów metalicznych (Pd, Ag, Au) i bimetalicznych. W układzie modelowym, metale nanoszono metodą osadzania magnetronowego, następnie wygrzewano, by uzyskać odpowiedni stopień dyspersji.

Znaleziono układy bimetaliczne, których zastosowanie prowadziło do uzyskania reflektancji powierzchniowej niższej niż w przypadku zastosowania pojedynczych metali. Na podstawie badań metodami XPS i SEM-EDS stwierdzono, że układy zawierające srebro wykazywały znacznie lepszą zdolność usuwania z powierzchni krzemu niż układy zawierające złoto. Zastosowana metoda trawienia pozostawiała skład i dystrybucję wiązań Si-F na powierzchni krzemu zależną od składu użytych katalizatorów. Wykorzystanie katalizatorów bimetalicznych Ag-Pd prowadziło do niższej reflektancji trawionej powierzchni niż w przypadku pojedynczych metali. Co więcej, morfologia uzyskanych powierzchni krzemu była zależna od składu i dystrybucji metali w układzie bimetalicznym.



## **PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE**





# 1. 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 PAN.

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 roku 2014 w jednostkach partnerskich studiowało 49 doktorantów (III/IV rok - 14 osoby, IV/V rok - 24 osoby, V rok - 11 osób).

W Instytucie, w roku 2014, w ramach projektu realizowanych było 15 prac doktorskich.

III/IV rok

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

IV/V rok

P. Batys (promotor: dr hab. P. Weroński prof. IKiFP) "Właściwości powierzchni nanocząstek i mechanizm ich transportu w układach wielowarstwowych"; A. Dziejicka (promotor: prof. B. Sulikowski) "Modyfikowane zeolity jako katalizatory transformacji terpenów"; Ż. Kalemba-Jaje (promotor: prof. A. Drelinkiewicz) "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności stałych polimerowych katalizatorów kwasowych"; A. Miłaczewska (promotor: dr hab. T. Borowski prof. IKiFP) "Badania nad strukturą i mechanizmem katalitycznego działania wybranych metaloenzymów niehemowych"; P. Niemieć (promotor: dr hab. R. Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP) "Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów"; M. Tatko (promotor: dr hab. P. Nowak prof. IKiFP) "Nowe materiały na podstawie tlenków metali ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych ogniwach paliwowych"; J. Dziejic (promotor: prof. P. Warszyński) "Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami".

W 2014 zakończyły realizację projektu i obroniły pracę doktorską:

A. Pajor-Świerzy (promotor: prof. P. Warszyński) "Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami"; M. Krzak (promotor: dr hab. P. Nowak prof. IKiFP) "Kompozytowe pokrycia antykorozyjne na podstawie żywic epoksydowych"; M. Nosek (promotor: dr hab. P. Weroński prof. IKiFP) "Zastosowanie techniki wirującej elektrody dyskowej do badania cienkich filmów koloidalnych"; A. Szymańska (promotor: prof. W. Łasocha) "Polimetalany i peroksokompleksy jako materiały do zastosowań w katalizie, medycynie i przemyśle"; M. Grzesiak-Nowak (promotor: prof. W. Łasocha) "Polimery koordynacyjne oraz związki metaloorganiczne typu MOF - materiały dla katalizy, inżynierii krystalicznej".



## 2. 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

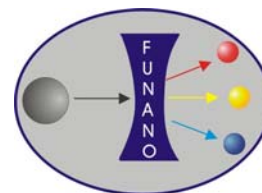
W ramach realizacji zadania 6 projektu Biotransformacje prowadzono badania nad dwoma systemami enzymatycznymi katalizującymi syntezę chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych: dehydrogenazą etylobenzenową (EBDH) i dehydrogenazą fenylotanolową (PEDH). Według założeń projektu w 5 roku jego realizacji zaplanowane było przede wszystkim przeprowadzenie kwantowo-mechanicznego modelowania reakcji PEDH, izotopowe testy weryfikujące mechanizm reakcji z EBDH, dalsze prace nad immobilizacją obu enzymów oraz transfer wiedzy do partnera przemysłowego. Ze względu na fakt, że transfer wiedzy odbył się w roku 2013 skupiono się na realizacji pozostałych celów naukowych oraz kontynuacją poprzednich prac badawczych.

W ramach testów izotopowych przeprowadzono badania szybkości reakcji EBDH z wykorzystaniem izotopowo znakowanej wody ( $H_2^{18}O$ ). Eksperymenty przeprowadzono z wykorzystaniem metody bezpośredniej i kompetencyjnej. Testy bezpośrednie wykazały nieznaczny odwrotny kinetyczny efekt izotopowy (KEI: 0.92-0.98) dla początkowych etapów reakcji (wysokie stężenie reutleniacza) oraz normalny KEI (1.03-1.3) dla etapów reakcji, gdzie szybkość kontrolowana była przez proces reutlenia. Z kolei metoda kompetycyjna wykazała na bardzo niewielki KEI, rzędu 1.006. Zestawienie wyników z wartościami KEI obliczonymi teoretycznie potwierdziły, że etap aktywacji wiązania C-H limituje szybkość reakcji.

Badania nad zastosowaniem immobilizowanych katalizatorów przeprowadzono z wykorzystaniem nośników krzemionkowych zsyntetyzowanych w Instytucie oraz dostarczonych przez partnerów projektu (Politechnika Śląska). W szczególności przebadano PEDH zimmobilizowaną i pracującą w trybie przepływowym na nośnikach monolitycznych. Wydajność immobilizacji ze względu na ilość zimmobilizowanego białka wyniosła 19%. Wyznaczono optymalne warunki prowadzenia procesu takie jak stężenie substratu (0.1-1.0 mM) oraz szybkość przepływu strumienia (0.1 ml/min), dla których osiągnął się wysoki stopień przereagowania (96-100%). Optymalizując pracę reaktora w reżimie odtwarzanego kofaktora określono także optymalne zakresy stężeń ko-substratu odtwarzającego NADH - izopropanol: bufor MES pH 5.8 (od 40:60 do 60:40), dla których osiągnął się najwyższy stopień przereagowania. Przeprowadzono syntezę alkoholi chiralnych z wykorzystaniem reaktorów okresowych, izopropanolu jako substrat odtwarzającego NADH i komórek *E.coli* z rekombinowanym PEDH jako katalizatora. Reakcje prowadzono w 20 ml reaktorach (90% i-PrOH/10% KPi pH 5.8) dla następujących 10 substratów. Uzyskano konwersje w granicach 100 % i wydajności uzyskanych produktów w granicach 80-100% (wyzn. metodą HPLC).

Przeprowadzone badania nad strukturą kompleksu enzym-substrat przedstawiono w publikacji Applied Microbiology and Biotechnology wraz z modelem neuronowym opisującym przebiegi kinetyczne w reaktorach okresowych. Analiza krzywych kinetycznych pozwoliła na wyznaczenie stałych równowagi dla 7 pochodnych acetofenonu. Badania modelowe wykazały, że powstający kompleks ES w konfiguracji Preloga odpowiada za wysoką enancjoselektywność reakcji. W ramach kwantowo-mechanicznego modelowania reakcji redukcji ketonów przez PEDH przeprowadzono badania dla modeli w różnym pH, tj. w środowisku kwaśnym ze sprotonowaną lizyną oraz w środowisku zasadowym z resztą lizyny w stanie zdeprotonowanym. Uzyskane wyniki odzwierciedlają przesunięcie równowagi reakcji wraz z pH w kierunku alkoholowego produktu (dla pH kwaśnego) oraz występowanie fenolanowej formy tyrozyny w wysokim pH (postulowany początkowy etap aktywacji alkoholu).

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



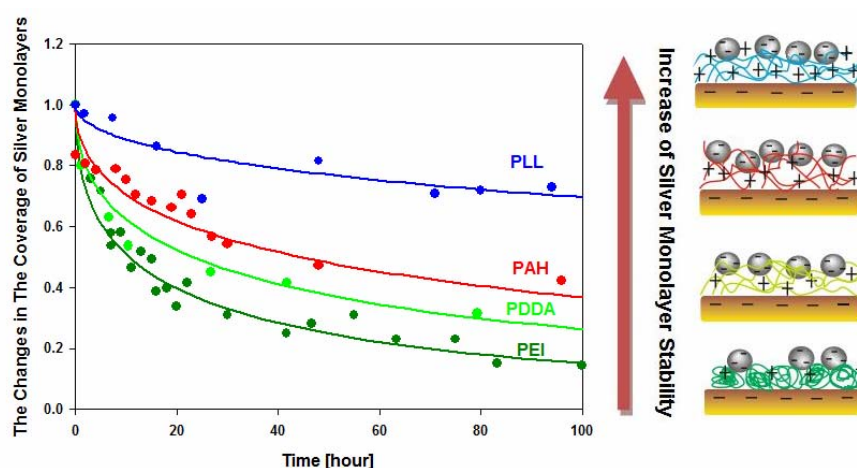
POIG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Przeprowadzono systematyczne badania adsorpcji i desorpcji nanocząstek srebra w warunkach transport dyfuzyjnego z powierzchni miki modyfikowanej różnymi polielektrolitami kationowymi (PLL, PAH, PDDA, PEI). Pokrycie cząstek, wyznaczane 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. Zmiany stopnia pokrycia w funkcji czasu określano przez bezpośrednie zliczanie ilości cząstek na mikrofotografiach SEM i AFM. Pomiary te umożliwiły wyznaczenie wpływu rodzaju polielektrolitu oraz siły jonowej suspensji srebra. Wykazano, że najbardziej stabilne monowarstwy nanocząstek srebra uzyskuje się w przypadku poli-L-lizyny (PLL), dla której charakterystyczny czas desorpcji wynosi 956 godzin, podczas gdy w przypadku często używanej w praktyce polialliloaminy (PEI) ten czas jest znacznie krótszy i wynosi 17 godzin. Wyniki te wskazują jednoznacznie, że kinetyka uwalniania nanocząstek srebra może być regulowana w szerokim zakresie przez odpowiedni dobór polielektrolitu, co ma duże znaczenie praktyczne.

Wyniki doświadczalne te były interpretowane przy pomocy modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji (RSA), co umożliwiło wyznaczenie równowagowych stałych adsorpcji  $K_a$  oraz energii wiązania. W ten sposób obliczono, że różnice w energii wiązania są mniejsze, niż dla czasów desorpcji i wynoszą dla PEI -15.9 kT, a dla and PLL -18.1, pomimo dwukrotnych różnic masach cząsteczkowych. Efekt ten pozostaje w zgodności z zaproponowanym modelem heterogenicznych oddziaływań elektrostatycznych między parami jonowymi.

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



Rysunek 1. Kinetyka uwalniania nanocząstek srebra osadzonych na monowarstwach różnych polielektrolitów kationowych. Punkty przedstawiają dane doświadczalne, a linie ciągłe obliczenia teoretyczne uzyskane na podstawie modelu RSA.



**MOL-MED**

#### **4. ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny**

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

Projekt Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie "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 w I KiFP PAN. W projekcie uczestniczą następujące jednostki partnerskie: Wydział Chemii UJ, Wydział Lekarski CM UJ, 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 2014 roku w ramach projektu zrealizowano następujące zadania:

- 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 3-dniowe warsztaty naukowe dla doktorantów z udziałem zaproszonych wykładowców w I KiFP PAN;

W ramach ISD doktoranci prowadzą badania naukowe w jednostkach partnerskich, otrzymują miesięczne stypendia oraz dokonują zakupów materiałów niezbędnych do realizacji prac doktorskich. Ponadto uczestniczą w seminariach zgodnie z Programem Ramowym studiów oraz 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)

Tematem prowadzonych badań było otrzymanie organicznych pochodnych minerałów ilastych, jako nośników do immobilizacji i stabilizacji nanocząstek metalicznych. Organiczne pochodne warstwowych krzemianów z grupy smektytów otrzymano poprzez stopniową delaminację pakietów minerału, zależną od ilości interkalowanych molekuł wody, a następnie wprowadzenie w przestrzeń międzywarstwową minerału kationów organicznych, w miejsce naturalnie występujących kationów nieorganicznych, kompensujących ujemny ładunek warstwy.

W celu otrzymania organicznej pochodnej montmorylonitu (Mt), jako czynnik stabilizujący kompozyt wprowadzono długie łańcuchy polimeru p-DADMACl (chlorku polydiallyldimetyloamoniowego) o stosunku wagowym Mt:p-DADMACl równym 1:0,05; 1:0,25 i 1:3. Ze względu na kationową naturę p-DADMACl i anionowy charakter warstw montmorylonitu utrzymanie polimeru pomiędzy warstwami minerału ilastego możliwe było dzięki stosunkowo dużym siłom elektrostatycznym.

Stopień delaminacji pakietów montmorylonitu w roztworze wodnym (zawiesiny 0,1; 1 i 2%) wpłynął na konfigurację i stopień uporządkowania polikationów p-DADMA w przestrzeniach międzywarstwowych pozwalając na łatwiejsze dopasowanie się i bardziej płaskie ułożenie się kationów w przestrzeniach montmorylonitu w przypadku suspensji 0,1%, o czym świadczy zmniejszenie się odległości międzypakietowej badanych układów w XRD. Otrzymane organiczne pochodne posłużyły, jako nośniki i stabilizatory cząstek metalicznych otrzymanych w wyniku wprowadzenia kationów srebra z wodnego roztworu  $\text{AgNO}_3$ , a następnie ich redukcji za pomocą  $\text{NaBH}_4$ . Rozmiar, stan agregacji oraz stabilność wprowadzonych nanocząstek metalicznego srebra kontrolowano na drodze doboru stężenia stabilizatora oraz stosunku molowego reduktora i soli srebrowej. Prowadzono optymalizację warunków syntezy w celu poprawy właściwości fizykochemicznych otrzymanych materiałów.

Analizy SEM-EDX oraz XRF potwierdziły wprowadzenie Ag w strukturę modyfikowanych minerałów ilastych oraz zdyspergowanie cząsteczek metalicznych w otrzymanym kompozycie. Analiza SEM-TEM wykazała utworzenie cząstek  $\text{Ag}^0$  o kształcie sferycznym, o średnicy zależnej od stopnia delaminacji pakietów montmorylonitu i zawartości p-DADMA. W przypadku układów o mniejszym stopniu delaminacji montmorylonitu (zawiesina 2%) i mniejszej zawartości p-DADMA (Mt:p-DADMACl = 1:0,25) otrzymano ziarna Ag o średnicy ok. 50 nm, natomiast 10 nm i mniejsze w przypadku układów mocniej zdelaminowanych (zawiesina 0,1%) o stosunku Mt:p-DADMACl równym 1:3. Zwiększenie stosunku molowego reduktora do soli wpłynęło na wzrost rozdrobnienia nanocząstek metalicznych w kompozycie. Redukcja soli srebrowej poza układem zawierającym polimer polydiallyldimetyloamoniowy powodowała agregację i wytrącanie się cząstek srebrowych o wielkościach nawet makrometrycznych.





## **INNE ZADANIA**



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

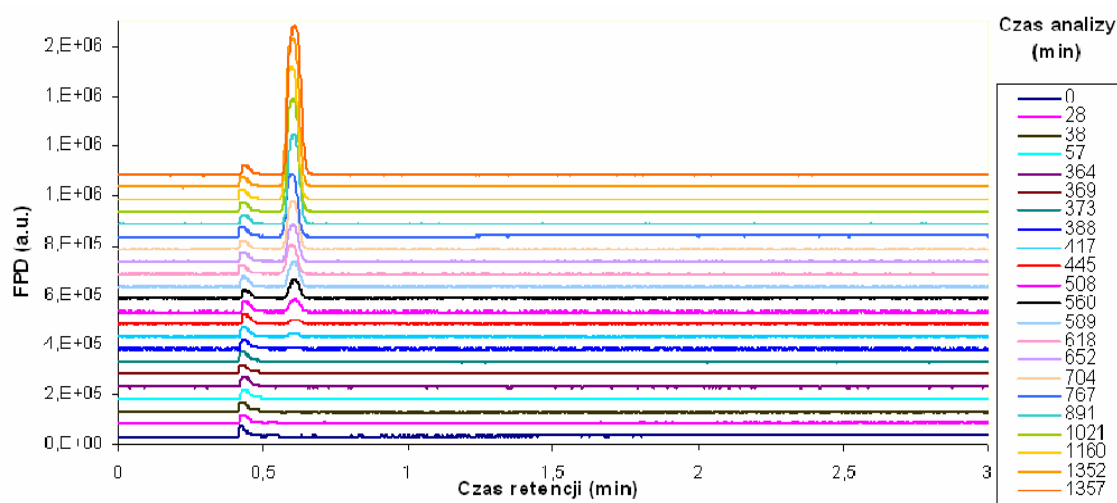
Prace badawcze dla Konsorcjum "Węglowe Ogniwa Paliwowe" Ministerstwa Gospodarki [2012-2014]

(kierownik projektu: dr Grzegorz Mordarski)

## Etap III - Odsiarczanie gazów wytworzonych w reaktorze Boudouarda do zasilania ogniw paliwowych ze stałym elektrolitem tlenkowym

Wysokotemperaturowe węglowe ogniwa paliwowe (Direct Carbon Fuel Cell - DCFC) mogą być zasilane gazami wytworzonymi w reaktorze Boudouarda. Reakcja odwrotna Boudouarda wytwarza tlenek węgla w procesie gazyfikacji węgla dwutlenkiem węgla. Ta prosta reakcja przebiega według następującego schematu  $C + CO_2 = 2CO$ . Jest ona endotermiczna i powinna przebiegać w wysokich temperaturach. W zależności od składu paliwa podawanego do reaktora produkowany gaz zawiera również zanieczyszczenia w postaci: cząstek stałych (PM), smoły, metali alkalicznych, halogenków (HCl) i związków siarki ( $H_2S$ ,  $CS_2$  and COS). Aby zapewnić stabilność pracy i długi czas działania, bardzo ważnym jest oczyszczenie tych gazów przed podaniem ich na stos ogniw paliwowych Solid Oxide Fuel Cell (SOFC). Z doniesień literaturowych oraz z badań własnych zauważamy, że istnieje pewna granica zanieczyszczeń związkami siarki występująca w gazach zasilających, po przekroczeniu której następuje nieodwracalna destrukcja centrów aktywnych anody.

Praca ta wykonywana jest głównie pod kątem budowy układu wysokotemperaturowego oczyszczania gazów. Prace szczegółowe odnośnie wysokotemperaturowego filtra usuwającego gazowe związki siarki dotyczą: syntezy absorbentów usuwających związki siarki; badań zależności wpływu temperatury na sprawność oczyszczania gazów z zanieczyszczeń; wyboru odpowiednich materiałów na efektywne oczyszczanie gazów powstających ze zgazowania węgla; porównanie metod wytwarzania absorbentów na efektywność oczyszczania, ciągłość pracy oraz prostotę procesu; badania pod kątem zastosowania w układzie filtrującym absorbentów i katalizatorów posiadających wysoką stabilność termiczną i pojemność sorbcyjną o wysokim TOS (time on stream).



Rysunek 1. Zmiana sygnału GC podczas procesu adsorpcji. Warunki eksperymentu:  $T = 800\text{ }^{\circ}\text{C}$ , symulowana kompozycja gazów wyjściowych z reaktora Boudouarda: 75%  $CO$ / 25%  $CO_2$ / 116 ppmv COS/ 24 ppmv  $CS_2$ , GHSV=1000h<sup>-1</sup>, COS = 0,6 min (RT), sygnał od  $CS_2$  nie pojawia się.

## 2. Advanced computer simulations of hyaluronan conformational properties

Projekt SCIEX, współpraca z ETH Zurich  
(*dr Wojciech Płaziński*)

Celem projektu jest wyjaśnienie unikalnych właściwości konformacyjnych hialuronianu (HA), indukowanych przez działanie zewnętrznej siły. HA jest nierozgałęzionym, naturalnym polocukrem zbudowanym z jednostek kwasu glukuronowego i N-acetylo-D-glukozaminy. Cząsteczki HA pełnią ważną rolę w wielu procesach biologicznych; mogą również znaleźć zastosowanie w przemyśle biomedycznym.

Główne cele projektu przedstawiają się następująco:

1. Rozszerzenie stosowalności pola siłowego GROMOS 56A6CARBO poprzez zaprojektowanie parametrów opisujących jednostki kwasu glukuronowego i N-acetylo-D-glukozaminy.
2. Przetestowanie i (ewentualnie) ulepszenie wydajności metod obliczeniowych, jakie można zastosować do symulacji krzywych AFM typu siła-długość łańcucha polimeru.
3. Charakterystyka molekularna zmian konformacyjnych w łańcuchu HA, wywołanych przez działanie zewnętrznej siły przy uwzględnieniu różnych temperatur środowiska. Celem jest interpretacja eksperymentalnych krzywych AFM wykazujących istotną rolę temperatury.

# **DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2014**

## **PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM**

### **MONOGRAFIE**

1. M.Oćwieja "Kinetyka tworzenia oraz stabilność monowarstw nanocząstek srebra. Badania podstawowe w dobie dynamicznego rozwoju nanotechnologii" (T.Czarnik, ed.), Wydawnictwo Bezkresy Wiedzy, Saarbrücken 2014, pp.248 [ISBN 978-3-639-89158-4]

### **ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH**

1. Z.Adamczyk, M.Dąbrowska, M.Kujda, K.Sofińska "Human serum albumin adsorption on solid substrates-electrokinetic studies", in: "Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology" (P.Kralchevsky, R.Miller, F.Ravera, eds.), CRC Press Taylor and Francis Group, Boca Raton 2013, pp.405-437 [ISBN 978-1-4665-6905-8] – printed 2014
2. T.Borowski, E.Broclawik "Bioinorganic Reaction Mechanisms – Quantum Chemistry Approach", in: "Computational Methods to Study the Structure and Dynamics of Biomolecules and Biomolecular Processes: From Bioinformatics to Molecular Quantum Mechanics" (A.Liwo, ed.), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg 2014, pp.783-808 [ISBN 978-3-642-28553-0]
3. P.Ozga, H.Kazimierzak, Z.Świątek, M.Słupska, A.Dębski, E.Bieleńska, R.Socha, B.Onderka, M.Michalec "Opracowanie podstaw elektrolitycznego otrzymywania stopów na bazie Zn-Sn oraz Mn-Sn z domieszką molibdenu lub wolframu zastępujących kadm oraz eliminujących Cr(VI)", in: "Zaawansowane materiały i technologie ich wytwarzania" (Z.Śmieszek, ed.), Instytut Metali Nieżelaznych, Gliwice 2014, pp.497-510 [ISBN 978-83-938792-1-2]
4. M.Radoń, E.Broclawik "Electronic Properties of Iron Sites and Their Active Forms in Porphyrin-Type Architectures", in: "Computational Methods to Study the Structure and Dynamics of Biomolecules and Biomolecular Processes: From Bioinformatics to Molecular Quantum Mechanics" (A.Liwo, ed.), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg 2014, pp.711-782 [ISBN 978-3-642-28553-0]
5. M.Szaleniec, P.Waligórski "Zastosowanie analizy dyskryminacyjnej i klasyfikacyjnych sieci neuronowych do przewidywania zjawiska samonieżgodności kapusty białej (*Brassica oleracea* var. *capitata*) w oparciu o eksperymenty elektroforetyczne", in: "Zastosowania statystyki i data mining w badaniach naukowych i innowacyjnych" (J.Jakobowski, ed.), StatSoft Polska, Kraków 2014, pp.45-61 [ISBN 978-83-88724-71-8]

### **PUBLIKACJJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY JOURNAL CITATION REPORTS (LISTA A)**

1. M.Adamczak, A.Kupiec, E.Jarek, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Preparation of the squalene-based capsules by membrane emulsification method and polyelectrolyte multilayer adsorption", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 462 (2014) 147-152

2. Z.Adamczyk, A.Bratak-Skicki, P.Żeliszewska, M.Wasilewska "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption at Solid Substrates", *Curr. Top. Med. Chem.*, 14 (2014) 702-729
3. Z.Adamczyk, K.Jamroży, P.Batys, A.Michna "Influence of ionic strength on poly(diallyldimethylammonium chloride) macromolecule conformations in electrolyte solutions", *J. Colloid Interface Sci.*, 435 (2014) 182-190
4. C.J.Allpress, A.Mińczewska, T.Borowski, J.R.Bennett, D.L.Tierney, A.M.Arif, L.M.Berreau "Halide-Promoted Dioxygenolysis of a Carbon-Carbon Bond by a Copper(II) Diketonate Complex", *J. Am. Chem. Soc.*, 136 (2014) 7821-7824
5. 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", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 443 (2014) 515-524
6. W.Barzyk, A.Pomianowski "Application of the Lippmann electrocapillary equation to adsorption potential shift at the air/solution interface - Analysis for undissociated n-decanoic acid", *J. Electroanal. Chem.*, 722 (2014) 119-130
7. P.Batys, P.Weroński "Porosity and tortuosity of layer-by-layer assemblies of spherical particles", *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 22 (2014) 065017
8. M.R.A.Blomberg, T.Borowski, F.Himo, R.-Z.Liao, P.E.M.Siegbahn "Quantum Chemical Studies of Mechanisms for Metalloenzymes", *Chem. Rev.*, 114 (2014) 3601-3658
9. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, B.Gil, J.-M.Krafft, S.Dźwigaj "The influence of the preparation procedures on the catalytic activity of Fe-BEA zeolites in SCR of NO with ammonia and N<sub>2</sub>O decomposition", *Catal. Today*, 235 (2014) 210-225
10. T.Borowski "DFT studies on extradiol ring cleavage of 4-nitrocatechol by homoprotocatechuate 2,3-dioxygenase (HPCD) - effects of metal substitution", *J. Biol. Inorg. Chem.*, 19 (2014) S286-S286
11. A.Bratak-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Human Fibrinogen Adsorption on Latex Particles at pH 7.4 Studied by Electrophoretic Mobility and AFM Measurements", *Curr. Top. Med. Chem.*, 14 (2014) 640-648
12. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń "Nitric oxide as a non-innocent ligand in (bio-) inorganic complexes: Spin and electron transfer in Fe-II-NO bond", *J. Inorg. Biochem.*, 136 (2014) 147-153
13. A.Brzycka, Woliński "Enforced conformational changes in the structural units of glycosaminoglycan (non-sulfated heparin-based oligosaccharides)", *RSC Adv.*, 4 (2014) 36640-36648
14. U.Bubniene, M.Oćwieja, B.Bugelyte, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, J.Voronovic, A.Ramanaviciene, A.Ramanavicius "Deposition of gold nanoparticles on mica modified by poly(allylamine hydrochloride) monolayers", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 441 (2014) 204-210

15. M.Cieśla, J.Barbasz "Kinetics of random sequential adsorption of nearly spherically symmetric particles", *Phys. Rev. E*, 89 (2014) 022401
16. M.Cieśla, J.Barbasz "Random packing of regular polygons and star polygons on a flat two-dimensional surface", *Phys. Rev. E*, 90 (2014) 022402
17. J.Cybulska, A.Brzycka, A.Zdunek, K.Woliński "Simulation of Force Spectroscopy Experiments on Galacturonic Acid Oligomers", *PLoS One*, 9 (2014) e107896
18. T.Czeppe, E.Korzniakova, P.Ozga, M.Wróbel, Lityńska-Dobrzyńska, G.F.Korzniakova, A.W.Korzniak, P.Czaja, R.Socha "Composition and Microstructure of the Al-Multilayer Graphene Composites Achieved by the Intensive Deformation", *Acta Phys. Pol. A*, 126 (2014) 921-927
19. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk "Mechanism of immunoglobulin G adsorption on mica-AFM and electrokinetic studies", *Colloid Surf. B-Biointerfaces*, 118 (2014) 57-64
20. M.Derewiński, P.Sarv, X.Sun, S.Mueller, A.C.van Veen, J.A.Lercher "Reversibility of the Modification of HZSM-5 with Phosphate Anions", *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 6122-6131
21. K.Drabczyk, R.Socha, P.Panek, G.Mordarski "Electrodeposition of thin metallic layer for solar cell electrodes", *Solder. Surf. Mt. Technol.*, 26 (2014) 18-21
22. A.Drelinkiewicz, Ż.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
23. M.M.Dudek, M.Mosiąlek, P.Nowak, J.Wojewoda-Budka, M.Reben "Silver migration at the Ag|Sm<sub>0.2</sub>Ce<sub>0.8</sub>O<sub>1.9</sub> interface", *J. Solid State Electrochem.*, 18 (2014) 2529-2537
24. M.Dudek, R.Socha "Direct Electrochemical Conversion of the Chemical Energy of Raw Waste Wood to Electrical Energy in Tubular Direct Carbon Solid Oxide Fuel Cells", *Int. J. Electrochem. Sci.*, 9 (2014) 7414-7430
25. M.Dudek, P.Tomczyk, R.Socha, M.Hamaguchi "Use of ash-free Hyper-coal as a fuel for a direct carbon fuel cell with solid oxide electrolyte", *Int. J. Hydrog. Energy*, 39 (2014) 12386-12394
26. M.Gackowski, K.Małek "Surface-enhanced Raman spectroscopy of tridehydropeptides adsorbed on silver electrode", *J. Mol. Struct.*, 1065 (2014) 143-149
27. T.Giela, K.Freindl, N.Spiridis, J.Korecki "Au(111) films on W(110) studied by STM and LEED - Uniaxial reconstruction, dislocations and Ag nanostructures", *Appl. Surf. Sci.*, 312 (2014) 91-96
28. K.Góra-Marek, A.Stępniewski, M.Radoń, E.Broclawik "Ammonia-modified Co(II) sites in zeolites: IR spectroscopy and spin-resolved charge transfer analysis of NO adsorption complexes", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 (2014) 24089-24098



29. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, P.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.*, 5 (2014) 23-40
30. 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.*, 18 (2014) 639-653
31. N.Guesmi, R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Characterization of molybdenum monomeric oxide species supported on hydroxylated silica: a DFT study", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 (2014) 18253-18260
32. J.Gurgul, K.Łątka, A.Pacyna, S.C.Peter, R.Poettgen "TbRhSn and DyRhSn - Detailed magnetic and Sn-119 Mossbauer spectroscopic studies", *Intermetallics*, 46 (2014) 56-64
33. E.Jamróż, G.Para, B.Jachimska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A.Para "Albumin-furcellaran complexes as cores for nanoencapsulation", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 441 (2014) 880-884
34. G.Jerz, N.Gebers, D.Szot, M.Szaleniec, P.Winterhalter, S.Wybraniec "Separation of amaranthine-type betacyanins by ion-pair high-speed countercurrent chromatography", *J. Chromatogr. A*, 1344 (2014) 42-50
35. S.Jose, P.Surendran, Y.Wang, I.Herrera, L.Krzemień, S.Whitlock, R.McLean, A.Sidorov, P.Hannaford "Periodic array of Bose-Einstein condensates in a magnetic lattice", *Phys. Rev. A*, 89 (2014) 051602
36. Ż.Kalemba-Jaje, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, E.N.Konyushenko, J.Stejskal "Bio-esters formation in transesterification and esterification reactions on carbon and silica supported organo-sulfonic acids-polyaniline solid catalysts", *Fuel*, 135 (2014) 130-145
37. A.Kania, M.Pilch, D.Rutkowska-Żbik, A.Susz, Heriyanto; G.Stochel, L.Fiedor "High-Pressure and Theoretical Studies Reveal Significant Differences in the Electronic Structure and Bonding of Magnesium, Zinc, and Nickel Ions in Metalloporphyrinoids", *Inorg. Chem.*, 53 (2014) 8473-8484
38. A.Karabasz, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, J.Bereta, K.Szczepanowicz "Cytotoxic activity of paclitaxel incorporated into polyelectrolyte nanocapsules", *J. Nanopart. Res.*, 16 (2014) 2340
39. K.Kilan, P.Warszyński "Thickness and permeability of multilayers containing alginate cross-linked by calcium ions", *Electrochim. Acta*, 144 (2014) 254-262
40. P.Konieczny, R.Pełka, M.Grzesiak-Nowak, A.Szymańska, W.Łasocha, Wasiutyński "Magnetic properties of copper dimolybdate  $\text{CuMo}_2\text{O}_7 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ", *J. Magn. Magn. Mater.*, 362 (2014) 180-183
41. P.Konieczny, R.Pełka, M.Grzesiak-Nowak, A.Szymańska, W.Łasocha, Wasiutyński "Magnetic Properties of Transition Metal Molybdates", *Acta Phys. Pol. A*, 126 (2014) 250-251

42. J.Koperski, T.Urbańczyk, M.Krośnicki, M.Strojecki "Free <- bound and bound <- bound profiles in excitation spectra of the B(3)1 <- X(1)0(+) transition in CdNg (Ng = noble gas) complexes", *Chem. Phys.*, 428 (2014) 43-52
43. T.Korona, D.Rutkowska-Żbik "A theoretical study on elementary building blocks for organic solar cells - Influence of a donor molecule on electronic spectrum of PCBM", *Comput. Theor. Chem.*, 1040 (2014) 243-258
44. 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", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 441 (2014) 788-795
45. 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", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 460 (2014) 391-400
46. A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, K.Matlak, P.Kuswik, M.Urbaniak, F.Stobiecki, L.D.Yao, S.van Dijken, J.Korecki "Tunable magnetic properties of monoatomic metal-oxide Fe/MgO multilayers", *Phys. Rev. B*, 90 (2014) 045428
47. A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, K.Matlak, E.Młyńczak, N.Spiridis, J.Korecki "Antiferromagnetic interlayer exchange coupling in epitaxial Fe/MgO/Fe trilayers with MgO barriers as thin as single monolayers", *J. Appl. Phys.*, 115 (2014) 104301
48. E.Lalik "Chaos in oscillatory sorption of hydrogen in palladium", *J. Math. Chem.*, 52 (2014) 2183-2196
49. M.Leżańska, A.Olejniczak, A.Pacuła, 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*, 227 (2014) 223-232
50. J.Li, A.Pant, Ch.F.Chin, W.H.Ang, C.Menard-Moyon, T.R.Nayak, D.Gibson, S.Ramaprabhu, T.Pańczyk, A.Bianco, G.Pastorin "In vivo biodistribution of platinum-based drugs encapsulated into multi-walled carbon nanotubes", *Nanomed.-Nanotechnol. Biol. Med.*, 10 (2014) 1465-1475
51. S.Łukasiewicz, K.Szczepanowicz "In vitro Interaction of Polyelectrolyte Nanocapsules with Model Cells", *Langmuir*, 30 (2014) 1100-1107
52. M.Łukomski "Painted wood. What makes the paint crack? (vol 13, pg S90, 2012)", *J. Cult. Herit.*, 15 (2014) E1-E1
53. T.Machej, E.M.Serwicka, M.Zimowska, R.Duła, 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-Gen.*, 474 (2014) 87-94
54. W.Makowski, M.Manko, P.Zabierowski, K.Mlekodaj, D.Majda, J.Szklarzewicz, W.Łasocha "Unusual adsorption behavior of volatile hydrocarbons on MOF-5 studied using thermodesorption methods", *Thermochim. Acta*, 587 (2014) 1-10

55. K.Małysa, R.Miller, P.Warszyński "Preface", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 441 (2014) 787-787
56. L.Manjakkala, K.Cvejin, J.Kulawik, K.Zaraska, D.Szwagierczak, R.P.Socha "Fabrication of thick film sensitive RuO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> and Ag/AgCl/KCl reference electrodes and their application for pH measurements", *Sens. Actuator B-Chem.*, 204 (2014) 57-67
57. L.Matachowski, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, M.Ruggiero-Mikolajczyk, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka "Efficient dehydration of ethanol on the self-organized surface layer of H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> formed in the acidic potassium tungstophosphates", *Appl. Catal. A-Gen.*, 469 (2014) 290-299
58. L.Matachowski, A.Drelinkiewicz, D.Mucha, J.Kryściak-Czerwenka, R.Rachwalik "Preparation of active Cs<sub>2</sub>HPW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> catalyst with the 'core-shell' secondary structure by a self-organizing process", *Appl. Catal. A-Gen.*, 469 (2014) 239-249
59. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Kubiak, K.Jamroży "Formation of PDADMAC monolayers evaluated in situ by QCM and streaming potential measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 428 (2014) 170-177
60. A.Mińczewska, T.Borowski, P.Porębski, K.L.Tkaczuk, M.Chruszcz, W.Minor, W.Minor "Acireductone dioxygenation - structural and computational studies", *J. Biol. Inorg. Chem.*, 19 (2014) S294-S294
61. E.Młyńczak, J.Gurgul, J.Przewoźnik, D.Wilgocka-Ślęzak, K.Freindl, N.Spiridis, J.Korecki "Effect of interfacial iron oxidation on the exchange bias in CoO/Fe bilayers", *Appl. Surf. Sci.*, 304 (2014) 86-90
62. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, E.Bieleńska "Hematite/silver nanoparticle bilayers on mica - AFM, SEM and streaming potential studies", *J. Colloid Interface Sci.*, 424 (2014) 75-83
63. M.Mosiąlek, M.Dudek, A.Michna, M.Tatko, A.Kędra, M.Zimowska "Composite cathode materials Ag-Ba<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Co<sub>0.8</sub>Fe<sub>0.2</sub>O<sub>3</sub> for solid oxide fuel cells", *J. Solid State Electrochem.*, 18 (2014) 3011-3021
64. M.Mosiąlek, G.Nawrat, L.Szyk-Warszyńska, J.Żak, A.Maciej, K.Radwański, A.Winiarski, J.Szade, P.Nowak, W.Simka "Anodic oxidation of the Ti-13Nb-13Zr alloy", *J. Solid State Electrochem.*, 18 (2014) 3073-3080
65. M.Mosiąlek, P.Nowak, M.Dudek, G.Mordarski "Oxygen reduction at the Ag vertical bar Gd<sub>0.2</sub>Ce<sub>0.8</sub>O<sub>1.9</sub> interface studied by electrochemical impedance spectroscopy and cyclic voltammetry at the silver point electrode", *Electrochim. Acta*, 120 (2014) 248-257
66. D.Nikolova, R.Edreva-Kardjieva, E.M.Serwicka, R.Dula, T.Grozeva "State of the components of (K)(Ni)W/gamma-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts as oxide precursors and after water-gas shift reaction in the presence of sulphur", *Appl. Catal. A-Gen.*, 480 (2014) 108-119
67. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Cyclic Voltammetry Characterization of Microparticle Monolayers", *Electrochim. Acta*, 133 (2014) 241-246

68. 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.*, 20 (2014) 2328-2343
69. M.Oszajca, A.Franke, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Brindell, G.Stochel, R.van Eldik "Temperature and Pressure Effects on C-H Abstraction Reactions Involving Compound I and II Mimics in Aqueous Solution", *Inorg. Chem.*, 53 (2014) 2848-2857
70. M.Pacia, P.Warszyński, W.Macyk "UV and visible light active aqueous titanium dioxide colloids stabilized by surfactants", *Dalton Trans.*, 43 (2014) 12480-12485
71. A.Pacula, K.Pamin, A.Zięba, J.Kryściak-Czerwenka, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz "Physicochemical and catalytic properties of montmorillonites modified with 12-tungstophosphoric acid", *Appl. Clay Sci.*, 95 (2014) 220-231
72. A.Pajor-Swierzy, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "The electroactive multilayer films of polyelectrolytes and Prussian blue nanoparticles and their application for H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> sensors", *Colloid Polym. Sci.*, 292 (2014) 455-465
73. T.Pańczyk, T.Da Ros, G.Pastorin, A.Jagusiak, J.Narkiewicz-Michalek "Role of Intermolecular Interactions in Assemblies of Nanocontainers Composed of Carbon Nanotubes and Magnetic Nanoparticles: A Molecular Dynamics Study", *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 1353-1363
74. T.Pańczyk, P.Wolski, A.Jagusiak, M.Drach "Molecular dynamics study of Congo red interaction with carbon nanotubes", *RSC Adv.*, 4 (2014) 47304-47312
75. M.Pławecka, D.Snihirova, B.Martins, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, M.F.Montemor "Self healing ability of inhibitor-containing nanocapsules loaded in epoxy coatings applied on aluminium 5083 and galvaneal substrates", *Electrochim. Acta*, 140 (2014) 282 -293
76. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "Fast, Metadynamics-Based Method for Prediction of the Stereochemistry-Dependent Relative Free Energies of Ligand-Receptor Interactions", *J. Comput. Chem.*, 35 (2014) 876-882
77. W.Płaziński, M.Drach "The dynamics of the conformational changes in the hexopyranose ring: a transition path sampling approach", *RSC Adv.*, 4 (2014) 25028-25039
78. W.Rudziński, E.Lalik "Aleksander Jerzy Groszek: a pioneer in adsorption calorimetry", *Adsorption*, 20 (2014) 999-1000
79. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "The Influence of Structural Parameters on the Reactivity of Model Complexes for Compound II: A Mini Review", *Top. Catal.*, 57 (2014) 946-952
80. M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Polystyrene Latex Particles", *Langmuir*, 30 (2014) 692-699

81. K.Samson, M.Śliwa, R.P.Socha, K.Góra-Marek, D.Mucha, D.Rutkowska-Żbik, J.-F.Paul, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, J.Śloczyński "Influence of ZrO<sub>2</sub> Structure and Copper Electronic State on Activity of Cu/ZrO<sub>2</sub> Catalysts in Methanol Synthesis from CO<sub>2</sub>", *ACS Catal.*, 4 (2014) 3730-3741
82. B.Scheid, J.Zawała, S.Dorbolo "Gas dissolution in antibubble dynamics", *Soft Matter*, 10 (2014) 7096-7102
83. J.Sobczyk, P.Fraćzek, M.Obarzanowski, J.M.del Hoyo-Melendez, Ł.Bratasz "Digital radiography (DR) and imaging analysis for evaluating the penetration and distribution of organic substances used in wood conservation", *Wood Sci. Technol.*, 48 (2014) 981-994
84. R.P.Socha, M.Szczepanik-Ciba, W.Powroźnik, N.Spiridis, J.Korecki "Epitaxial alpha-Mn(001) films on MgO(001)", *Thin Solid Films*, 556 (2014) 137-141
85. K.Sofińska, Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Nattich-Rak "Recombinant Albumin Mono layers on Latex Particles", *Langmuir*, 30 (2014) 250-258
86. M.Sowa, K.Greń, A.I.Kukharenko, D.M.Korotin, J.Michalska, L.Szyk-Warszyńska, M.Mosiąlek, J.Żak, E.Pamuła, E.Z.Kurmaev, S.O.Cholakh, W.Simka "Influence of electropolishing and anodic oxidation on morphology, chemical composition and corrosion resistance of niobium", *Mater. Sci. Eng. C-Mater. Biol. Appl.*, 42 (2014) 529-537
87. 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.*, 18 (2014) 3129-3142
88. N.Spiridis, E.Madej, J.Korecki "Adsorption of Gold on an Iron-Rich Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) Surface", *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 2011-2017
89. Z.Starowicz, M.Lipiński, R.P.Socha, K.Berent, G.Kulesza, P.Ozga "Photochemical silver nanoparticles deposition on sol-gel TiO<sub>2</sub> for plasmonic properties utilization", *J. Sol-Gel Sci. Technol.*, (2014), DOI 10.1007/s10971-014-3522-2 – on-line journal
90. 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.*, 59 (2014) 225-232
91. J.Szaleniec, M.Szaleniec, P.Stręk, A.Boroń, K.Jabłońska, J.Gawlik, J.Składzień "Outcome prediction in endoscopic surgery for chronic rhinosinusitis - A multidimensional model", *Adv. Med. Sci.*, 59 (2014) 13-18
92. M.Szaleniec, A.Dudzik, B.Kozik, T.Borowski, J.Heider, M.Witko "Mechanistic basis for the enantioselectivity of the anaerobic hydroxylation of alkylaromatic compounds by ethylbenzene dehydrogenase", *J. Inorg. Biochem.*, 139 (2014) 9-20
93. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Formation of oil filled nanocapsules with silica shells modified by sequential adsorption of polyelectrolytes", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 441 (2014) 885-889

94. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul "Hydrogenation of cinnamaldehyde in the presence of PdAu/C catalysts prepared by the reverse water-in-oil microemulsion method", *Appl. Catal. A-Gen.*, 487 (2014) 1-15
95. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, R.P.Socha "Characterization of casein and poly-L-arginine multilayer films", *J. Colloid Interface Sci.*, 423 (2014) 76-84
96. A.Szymańska, W.Nitek, D.Rutkowska-Żbik, W.Łasocha "Preparation, structural characterization, and decomposition studies of two new gamma-octamolybdates of 4-methylpyridine", *Mon. Chem.*, 145 (2014) 921-929
97. M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Żelazny, R.Grabowski "Influence of Montmorillonite K10 Modification with Tungstophosphoric Acid on Hybrid Catalyst Activity in Direct Dimethyl Ether Synthesis from Syngas", *Catal. Lett.*, 144 (2014) 1884-1893
98. Z.Tabor, P.Warszyński "Modeling dissolution controlled release of inhibitor from a damaged coating", *Corrosion Sci.*, 82 (2014) 290-296
99. M.Tataruch, J.Heider, J.Bryjak, P.Nowak, D.Knack, A.Czerniak, J.Liesiene, M.Szaleniec "Suitability of the hydrocarbon-hydroxylating molybdenum-enzyme ethylbenzene dehydrogenase for industrial chiral alcohol production", *J. Biotechnol.*, 192 (2014) 400-409
100. V.Ulaganathan, M.Krzan, M.Lotfi, S.S.Dukhin, V.I.Kovalchuk, A.Javadi, D.Z.Gunes, C.Gehin-Delval, K.Małysa, R.Miller "Influence of beta-lactoglobulin and its surfactant mixtures on velocity of the rising bubbles", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, 460 (2014) 361-368
101. D.Wodka, R.P.Socha, E.Bielańska, M.Elżbiaciak-Wodka, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic activity of titanium dioxide modified by Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles", *Appl. Surf. Sci.*, 319 (2014) 173-180
102. A.M.Wójcik, E.Broclawik, T.Borowski, P.Siegbahn "Insights into reaction mechanisms of HMS and HPPD", *J. Biol. Inorg. Chem.*, 19 (2014) S297-S297
103. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, M.Lundberg, G.Moran, T.Borowski "Role of Substrate Positioning in the Catalytic Reaction of 4-Hydroxyphenylpyruvate Dioxygenase-A QM/MM Study", *J. Am. Chem. Soc.*, 136 (2014) 14472-14485
104. J.Zawała, E.Małysa, M.Krzan, K.Małysa "Monitoring of Contamination of Coal Processing Plants and Environmental Waters Using Bubble Velocity Measurements – Advantages and Limitations", *Physicochem. Probl. Mineral Process.*, 50 (2014) 143-157
105. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk, M.Cieśla "Human Fibrinogen Adsorption on Positively Charged Latex Particles", *Langmuir*, 30 (2014) 11165-11174

#### **PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY MNiSW (LISTA B)**

1. M.Dudek, P.Tomczyk, B.Lis, G.Mordarski "Węglowe ogniwa paliwowe – wybrane inicjatywy krajowe", *Polityka Energetyczna - Energy Policy J.*, 17 (2014) 81-91

2. A.Kędra, R.P.Socha, M.Zimowska, P.Panek, L.Szyk- Warszyńska, M.Lipiński, P.Warszyński "The morphology and optical properties of silicon etched with bimetallic catalysts", *Elektronika*, 8 (2014) 64-67
3. K.P.Korona, S.Grankowska, A.Iwan, T.Korona, D.Rutkowska-Żbik, M.Kamińska "Optical spectroscopy of polyazomethine-PCBM nanostructures", *Elektronika*, 9 (2014) 92-94
4. W.Łasocha, K.Luberda-Durnaś "New Methods in Investigations of Polycrystalline Materials", *Wiad. Chem.*, 68 (2014)507-543
5. P.Panek, K.Drabczyk, R.P.Socha, P.Zięba "Wpływ tylnej warstwy typu p+ na parametry ogniwa słonecznego na bazie krzemu typu p na podstawie obliczeń wykonanych programem komputerowym PC-1D", *Elektronika*, 8 (2014) 67-69

#### **POZOSTAŁE PUBLIKACJE NAUKOWE (BEZ OKREŚLONEGO IF)**

1. K.Bieda, B.Jachimska "Poly(amidoamine) (PAMAM) dendrimers: physicochemical characterization for multifunctional applications", *FEBS Journal special issue*, 281 (2014) 665-666
2. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Lysozyme Adsorption at SiO<sub>2</sub> and Mica Surfaces: Atomistic Molecular Dynamics and Experiments", *FEBS Journal special issue*, 281 (2014) 628
3. M.Krasowska, A.Niecikowska, D.Beattie "Challenges in imaging of soft layers and structures at solid surfaces using atomic force microscopy", *Surf. Innov.*, 2 (2014) 151–159
4. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Morga, E.Kowalska "Comparative physicochemical studies of human albumin monomer and the synthetic cross-linked dimer", *FEBS Journal special issue*, 281 (2014) 404
5. W.Łasocha, A.Szymańska, M.Oszajca, G.Appleby, K.Pamin, J. Połtowicz "Polymolybdates and Peroxomolybdates: Candidates for Catalysts in Industry", *Acta Cryst.*, A70 (2014), C589
6. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska, M.Cieśla "Fibrinogen Monolayers of Controlled Coverage and Conformations for Biosensing Applications", in: "Key Engineering Materials-Materials and Applications for Sensors and Transducers III" (E.Hristoforou, D.S.Vlachos, eds.), Trans Tech Publications Inc., Pfaffikon 2014, pp.243-246 [ISBN 978-3-03835-051-4]
7. M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Monolayers of silver nanoparticles obtained by chemical reduction methods", *Surf. Innov.*, 2 (2013) 160-172 - ogłoszone w 2014
8. M.Oćwieja, A.Gorczyca, M.Niemiec, Z.Adamczyk, E.Pociecha "Effect of charge-stabilized silver nanoparticles with various surface properties on physiological state of seedlings of *Triticum aestivum*", *FEBS Journal special issue*, 281 (2014) 622
9. A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński „Polyelectrolyte films with Prussian Blue nanoparticles and conductive polymers”, *Surf. Innov.*, 2 (2014) 184-193

10. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, P.Warszyński "Enhancement of the electrocatalytic properties of Prussian Blue containing multilayer films formed by reduced graphene oxide", *Colloid Interface Sci. Commun.*, 1 (2014) 6-9
11. K.Sofińska, Z.Adamczyk, M.Kujda "Monolayers of human albumins on colloidal carrier particles and flat surfaces: thorough physicochemical characteristics in terms of electrokinetic methods", *FEBS Journal special issue*, 281 (2014) 413
12. M.Strojecki "Szafa gra..., czyli jak dzięki emisji akustycznej usłyszeć co w trawie piszczy, o czym szumią wierzby, co mówią rzeźby i na co narzekają historyczne meble", *Forum Akademickie*, (2) (2014) 50-52
13. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Air-Assisted Bubble Immobilization at Hydrophilic Porous Surface", *Surf. Innov.*, 2 (2013) 235-244 - ogłoszone w 2014

### Publikacje ogłoszone w formie elektronicznej

1. Ł.Bratasz, M.Łukomski, A.Klisińska-Kopacz, W.Zawadzki, K.Dzierżęga, M.Bartosik, J.Sobczyk, F.J.Lennard, R.Kozłowski "Risk of climate-induced damage in historic textiles", *Strain*, DOI: 10.1111/str.12122
2. A.Dudzik, W.Snoch, P.Borowiecki, J.Opalinska-Piskorz, M.Witko, J.Heider, M.Szaleniec "Asymmetric reduction of ketones and  $\beta$ -keto esters by (S)-1-phenylethanol dehydrogenase from denitrifying bacterium *Aromatoleum aromaticum*", *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, DOI: 10.1007/s00253-014-6309-z
3. S.S.Dukhin; V.I.Kovalchuk; M.Lotfi; M.Krzan; K.Małyś, R.Miller "Dynamics of Rear Stagnant Cap Formation at the Surface of Rising Bubbles in Surfactant Solutions for Small Marangoni Number and Slow Sorption Kinetics", *Adv. Colloid Interface Sci.*, DOI: 10.1016/j.cis.2014.10.002
4. D.Kosior, J.Zawała, A.Niecikowska, K.Małyś "Influence of non-ionic and ionic surfactants on kinetics of the bubble attachment to hydrophilic and hydrophobic solids", *Colloid Surf. A-Physicochem. Eng. Asp.*, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2014.11.043
5. L.Krzemień, M.Łukomski, A.Kijowska, B.Mierzejewska "Combining Digital Speckle Pattern Interferometry with Shearography in a New Instrument to Characterize Surface Delamination in Museum Artefacts", *J. Cult. Herit.*, DOI:10.1016/j.culher.2014.10.006
6. L.Krzemień, M.Strojecki, S.Wroński, J.Tarasiuk, M.Łukomski "Dynamic response of earlywood and latewood within annual growth ring structure of Scots pine subjected to changing relative humidity", *Holzforschung*, DOI: 10.1515/hf-2014-0132
7. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska, M.Sadowska "Revealing fibrinogen monolayer conformations at different pHs: Electrokinetic and colloid deposition studies", *J. Colloid Interface Sci.*, DOI: 10.1016/j.jcis.2014.10.001
8. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, K.Kubiak "Silver particle monolayers - formation, stability, applications", *Adv. Colloid Interface Sci.*, DOI: 10.1016/j.cis.2014.07.001



9. E.Pięta, E.Proniewicz, B.Boduszek, T.K.Olszewski, M.Nattich-Rak, Y.Kim, L.M.Proniewicz "Potential-Dependent SERS Studies on the Adsorption of (Diphenylphosphoryl)(pyridin-2, -3, and -4-yl)methanol on Ag, Au, and Cu Electrodes", *Appl. Surf. Sci.*, (2014)
10. B.Sulikowski "Solid-state  $^{29}\text{Si}$  and  $^{27}\text{Al}$  NMR studies of natural mesolite", *Microporous and Mesoporous Mater.*, DOI: 10.1016/j.micromeso.2014.12.024
11. K.Szczepanowicz, U.Bazylińska, J.Pietkiewicz, L.Szyk-Warszyńska, K.A.Wilk, P.Warszyński "Biocompatible long-sustained release oil-core polyelectrolyte nanocarriers: From controlling physical state and stability to biological impact", *Adv. Colloid Interface Sci.*, DOI: 10.1016/j.cis.2014.10.005.
12. K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Magnetically responsive liquid core polyelectrolyte nanocapsules", *J. Microencapsulation*, DOI: 10.3109/02652048.2014.950709
13. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, A.Kędra, E.Bielańska "Composite cathode materials  $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3\text{-La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{FeO}_3$  for solid oxide fuel cells", *Solid State Ionics*, DOI: 10.1016/j.ssi.2014.10.011
14. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Formation and influence of the dynamic adsorption layer on kinetics of the rising bubble collisions with solution/gas and solution/solid interfaces", *Adv. Colloid Interface Sci.*, DOI: 10.1016/j.cis.2014.07.013

#### **PUBLIKACJE Z ROKIEM WYDANIA 2015**

1. K.Bahranowski, W.Włodarczyk, E.Wisła-Walsh, A.Gaweł, J.Matusik, A.Klimek, B.Gil, A.Michalik-Zym, R.Duła, R.P.Socha, E.M.Serwicka "[Ti,Zr]-pillared montmorillonite – A new quality with respect to Ti- and Zr-pillared clays", *Microporous Mesoporous Mater.*, 202 (2015) 155-164
2. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, B.Gil, B.Marszałek, S.Dźwigaj "Influence of iron state and acidity of zeolites on the catalytic activity of FeHBEA, FeHZSM-5 and FeHMOR in SCR of NO with  $\text{NH}_3$  and  $\text{N}_2\text{O}$  decomposition", *Microporous Mesoporous Mater.*, 203 (2015) 73-85
3. M.Elźbieciak-Wodka, M.Kolasińska-Sojka, P.Nowak, P.Warszyński "Comparison of permeability of poly(allylamine hydrochloride)/ and poly(diallyldimethylammonium chloride)/poly(4-styrenesulfonate) multilayer films: linear vs. exponential growth", *J. Electroanal. Chem.*, 738 (2015) 195-202
4. M.Kujda, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, O.Bocheńska, G.Braś, A.Kozik, E.Bielańska, J.Barbasz "Charge Stabilized Silver Nanoparticles Applied as Antibacterial Agents", *J. Nanosci. Nanotechnol.*, 15 (2015) 3574-3583
5. J.I.Loch, P.Bonarek, A.Polit, S.Świątek, M.Czub, M.Ludwikowska, K.Lewiński "Conformational variability of goat  $\beta$ -lactoglobulin: Crystallographic and thermodynamic studies", *Int. J. Biol. Macromol.*, 72 (2015) 1283-1291

6. D.Majda, W.Makowski, M.Mańko, K.Mlekodaj, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Porosity characterization of SBA-15 silicas with thermoporosimetry of water and n-alkanes – The effect of the probe liquid nature", *Microporous and Mesoporous Mater.*, 201 ( 2015) 141-150
7. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Adsorption of tannic acid on polyelectrolyte monolayers determined in situ by streaming potential measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 438 (2015) 249-258
8. A.Pacuła, P.Nowak, W.Makowski, R.P.Socha "The influence of layered double hydroxide composition on the morphology, porosity and capacitive properties of nitrogen-doped carbon materials prepared via chemical vapor deposition", *Microporous Mesoporous Mater.*, 201 (2015) 1-9.
9. T.Pańczyk, Ł.Kończak, S.Zapotoczny, M.Szabelski, M.Nowakowska "Molecular dynamics simulations of proton transverse relaxation times in suspension of magnetic nanoparticles", *J. Colloid Interface Sci.*, 437 (2015) 187-196

## **STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH**

1. Z.Adamczyk "Nanoparticle and protein adsorption guest for a universal mechanism", *Book of Abstracts. Conf. Nanotechnology: Research and Development, Vilnius 2014*, p.33 [ISBN978-9955-9371-4-2]
2. Z.Adamczyk "Protein Adsorption - Mythology and (or) Science", *Book of Abstracts. 5<sup>th</sup> US-Poland Workshop: Thermodynamics of Complex Fluids and Interfaces, Warszawa 2014*, p. 16
3. Z.Adamczyk, M.Morga, A.Michna "Adsorption Mechanisms of Polyelectrolytes and Proteins", *Book of Abstracts. 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution, Coimbra 2014*, p.218 [ISBN 978-972-99512-3-7]
4. K.Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, J.Matusik, A.Michalik-Zym, E.Serwicka, E.Wisła-Walsh, W.Włodarczyk "Pillared montmorillonites as catalysts for removal of chlorinated volatile organic compounds from air-textural characterization", *Book of Abstracts. 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014*, p.105
5. P.Batys, K.Jamroży, A.Michna, Z.Adamczyk "Konformacje polielektrolitów w roztworach", *Materiały. Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014*, p.24 [ISBN 978-83-60514-21-4]
6. P.Batys, P.Weroński "Transport Properties of Layer-by-Layer Assemblies of Spherical Particles at Solid/Liquid Interface", *Book of Abstracts. IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sudomie 2014*, p.18
7. P.Batys, P.Weroński, M.Nosek "Multilayer films of colloidal particles - structure analysis", *Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, UAM, Poznań 2014*, p.36

8. K.Bieda, B.Jachimska "Structure of adsorbed 6<sup>th</sup> generation poly(amidoamine) PAMAM dendrimers on SiO<sub>2</sub> surface", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.280 [ISBN 978-83-60514-19-1]
9. K.Bieda, B.Jachimska "Dendrimers – hyperbranched macromolecules as new tools in biomedical applications", Book of Abstracts. Int. Conf. Challenges of Biotechnology in 21<sup>st</sup> Century, Kraków 2014 p.70
10. K.Bieda, B.Jachimska "Dendrimers: new nanocontainers for the application in medicine", Streszczenia. Konf. Horyzonty Nauki 2014: Forum Prac Dyplomowych, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2014 p.100
11. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrodechlorination of CCl<sub>4</sub> over carbon-supported palladium-gold catalysts prepared by reverse 'water-in-oil' microemulsion method", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.684 [ISBN 978-83-60514-20-7]
12. E.Broclawik, M.Radoń, T.Borowski, A.Stępniewski "Spin- and electron density redistribution upon binding of noninnocent ligand by iron and related TM sites in enzymatic environment", Book of Abstracts. Conf. From Computational Biophysics to Systems Biology CBSB14, Gdańsk 2014, p.20
13. E.Broclawik, A.Stępniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń "Donor modifiers of Co(II) active sites: explicit spin and charge transfer channels for NO - NH<sub>3</sub> co-adsorption in zeolites", Book of Abstracts. Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014, p.21
14. A.Czapla, A.Micek-Ilnicka "Synteza diizopropylowego eteru DIPE katalizowana przez heteropolikwas H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.92 [ISBN 978-83-60514-19-1]
15. M.Ćwięka, B.Jachimska "Characterization of proteins structures using the QCM method", Konf. Horyzonty Nauki 2014: Forum Prac Dyplomowych, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2014 p.97
16. M.Ćwięka, B.Jachimska, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran "Adsorption of Lysozyme on SiO<sub>2</sub> surface (experiments and simulations)", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.281 [ISBN 978-83-60514-19-1]
17. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Understanding Lysozyme Adsorption Phenomena", Book of Abstracts. Int. Conf. Challenges of Biotechnology in 21<sup>st</sup> Century, Kraków 2014 p.71
18. K.Drabczyk, R.P.Socha, A.Skwarek "Copper deposition on screen printed electrical paths for solar cell application - the surface studies", Mater. 38<sup>th</sup> Int. Conf. of IMAPS-CPMT, Rzeszów 2014
19. A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Kosydar, W.Rojek, J.Gurgul, T.Szumelda, M.Kołodziej, R.Tokarz-Sobieraj "Kataliza – bezpieczeństwo reaktorów nuklearnych", E-Book of Abstracts. Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, IChF PAN, Warszawa 2014

20. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Oszajca, A.Franke, D.Rutkowska-Zbik, M.Brindell, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik "Theoretical studies on reactivity of model complexes for Cpd I and Cpd II", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.207 [ISBN 978-83-60514-19-1]
21. M.Dudek, P.Tomczyk, M.Mosiąlek, S.Żurek, A.Rażniak "Zastosowanie elektrod punktowych do badań procesów elektrochemicznych w stałotlenkowych ogniwach paliwowych", Mater. 13. Konf. Elektroanaliza w Teorii i Praktyce, Akapit, Kraków 2014, p.33 [978-83-63663-44-5]
22. A.Dudzik, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, M.Szaleniec, M.Witko "Prediction of reactor progress-curves of enzymatic reduction of para-substituted acetophenones with artificial neural networks", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, pp.196-197 [ISBN 978-83-60514-19-1]
23. A.Dudzik, M.Szaleniec, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko, J.Heider "(S)-1-Phenylethanol dehydrogenase as a catalyst in prochiral compounds reduction", Book of Abstracts. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014, p.236 [ISBN 978-3-941492-76-9]
24. A.Dudzik, M.Szaleniec, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko, J. Heider "(S)-1-Phenylethanol dehydrogenase as a catalyst in prochiral compounds reduction", Book of Abstracts. 2<sup>nd</sup> Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, IChO PAN, Warszawa 2014, p.70
25. A.Dudzik, M.Szaleniec, M.Witko "Theoretical studies of enzyme-substrate interactions in phenylethanol dehydrogenase", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, pp.198-199 [ISBN 978-83-60514-19-1]
26. R.Dula, B.Napruszewska, J.Kryściak-Czerwenka, W.Rojek, T.Machej, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Określenie wpływu zawartości Mn w prekursorach typu charmarytu na właściwości prekursorów i produktów ich kalcynacji", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.93 [ISBN 978-83-60514-19-1]
27. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, E.Bielańska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, A.Drelinkiewicz, J.Kryściak-Czerwenka, A.Bukowska, W.Bukowski "Badanie wpływu rozpuszczalnika na aktywność katalityczną katalizatorów rutenowych w reakcji uwodornienia acetolu", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.95-96 [ISBN 978-83-60514-19-1]
28. K.Durczyk, J.Rakoczy, B.Sulikowski "Shape-selectivity in alkylation and isomerization reactions over FAU MFI and MOR type zeolites", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.97 [ISBN 978-83-60514-19-1]
29. K.Durczyk, B.Sulikowski "Wpływ modyfikacji termochemicznych zeolitu typu Y na jego właściwości fizykochemiczne", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.232 [ISBN 978-83-60514-19-1]

30. K.Durczyk, B.Sulikowski "Ultrastabilne formy zeolitu typu Y: otrzymywanie i właściwości fizykochemiczne", Book of Abstracts. 3. Ogólnopolska Konferencja 'Pomiędzy Naukami', Zjazd Fizyków i Chemików, HARIT Krzysztof Bednarek, Chorzów 2014, p.27 [ISBN 978-83-62408-10-8]
31. K.Durczyk, B.Sulikowski "Ultrastabilne formy zeolitu typu Y w świetle badań  $^{29}\text{Si}$  i  $^{27}\text{Al}$  MAS NMR", Abstracts on-line. 45. Ogólnopolskie Semin., nt. Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2014
32. J.Dziedzic, G.Potasiewicz, K.Szczepanowicz, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Formation of capillary-bridges with embedded nanoparticles for thermal joints", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.282-283 [ISBN 978-83-60514-19-1]
33. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Chemical oxidation supported photodecomposition of industrial dyes", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.98 [ISBN 978-83-60514-19-1]
34. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic degradation of the humic substances enhanced by chemical oxidation", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.148 [ISBN 978-83-60514-20-7]
35. A.Dziedzicka, Ł.Kuterasiński, B.Sulikowski "Structural changes in natural clinoptilolite upon dealumination and desilication", Book of Abstracts. 6th FEZA Conf. Leipzig 2014
36. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Właściwości fizykochemiczne modyfikowanych klinoptylolitów ze złóż naturalnych", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, pp.55-56 [ISBN 978-83-60514-19-1]
37. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Dealuminiowanie zeolitów naturalnych w świetle badań metodą spektroskopii NMR w cieple stałym", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.233 [ISBN 978-83-60514-19-1]
38. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Dealuminiowany i desilikowany naturalny klinoptylolit w świetle badań metodą spektroskopii NMR w cieple stałym", Book of Abstracts. 3. Ogólnopolska Konferencja 'Pomiędzy Naukami', Zjazd Fizyków i Chemików, HARIT Krzysztof Bednarek, Chorzów 2014, p.31 [ISBN 978-83-62408-10-8]
39. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Właściwości fizykochemiczne modyfikowanych klinoptylolitów ze złóż naturalnych", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, pp.55-56 [ISBN 978-83-60514-19-1]
40. S.Dźwigaj, P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido "The influence of the preparation procedure on the catalytic activity of Fe-BEA zeolites in SCR of NO with ammonia and N<sub>2</sub>O decomposition", Book of Abstracts. 7<sup>th</sup> Tokyo Conf. on Advanced Catalytic Science and Technology TOCAT7, Kyoto 2014, p.34

41. M.Elżbieciak-Wodka, F.J.Montes Ruiz-Cabello, P.Maroni, M.Borkovec "Direct force measurements between negatively charged particles in presence of monovalent and multivalent ions", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
42. U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Czapla, A.Bielański "Ethoxonium ion as intermediate species in ethanol dehydration on mono- and bi-cationic salts of H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.100 [ISBN 978-83-60514-19-1]
43. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Deposition of zeolite nanoparticles onto highly porous silica monolith", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014, p.319
44. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Nanoszenie nanocząstek zeolitu ZSM-5 na funkcjonalizowaną powierzchnię porów monolitu krzemionkowego", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.234 [ISBN 978-83-60514-19-1]
45. 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", Book of Abstracts. LEEM/PEEM 9<sup>th</sup> Workshop, Forschungszentrum Jülich GmbH, Berlin 2014 p.49
46. G.Gochev, J.Won, V.Ulaganatha, I.Retzlaff, J.Krägel, M.Krzan, K.Malya, V.B.Fainerman, E.V.Aksenenko, D.Exerowa, R.Miller "Dynamic surface properties and foam film behaviour of  $\beta$ -lactoglobulin (BLG) solutions", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> European Conf. on Foams and Applications - Eurofoam 2014, Thessaloniki 2014, p. 113 [ISBN 978-960-243-694-3]
47. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Strength of acid sites on amorphous silica from DFT calculations", Programme and Abstracts Book. Proc. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014, p.91
48. R.Gryboś, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda "Opis oddziaływania klasterów mono i bi- metalicznych z nośnikiem i zaadsorbowaną wodą", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.353 [ISBN 978-83-931072-6-1]
49. R.Gryboś, R.Tokarz-Sobieraj, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański, M.Witko "Aktywność katalityczna soli Al, Ga, In, heteropolikwasów wolframowych i molibdenowych w eksperymencie i w teorii", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.353 [ISBN 978-83-931072-6-1]
50. M.Grzesiak-Nowak, J.Dranka, A.Rafalska-Łasocha, A.Pawlak, W.Łasocha "Investigation of pigments and ground layers by  $\mu$ -XRPD", Programme and Abstracts Book. 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014, p.40
51. M.Grzesiak-Nowak, A.Szymańska, W.Łasocha "Badania grupy związków kadmu z liniowymi diaminami", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.284 [ISBN 978-83-60514-19-1]

52. J.Handzlik, K.Kurleto, H.Guesmi, F.Tielens, R.Gryboś "Structure of isolated Cr(VI), Mo(VI) and W(VI) oxide species on silica – a comparative periodic DFT study", Programme and Abstracts Book. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014, p.93
53. B.Jachimska, K.Bieda "Structure of Adsorbed Dendrimer Monolayers Investigated by Combining QCM-D and MP-SPR Techniques", Book of Abstracts. Symp. of the Analytical Division of SPQ-2014, Coimbra 2014 p.O-20
54. D.Jantas, M.Piotrowski, W.Lasoń "Neuroprotective effects of undecylenic acid (UDA) against hydrogen peroxide-, staurosporine- and doxorubicin-induced cell damage in human neuroblastoma SH-SY5Y cells", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Int. Symp. Molecular Basis of Pathology and Therapy in Neurological Disorders, Warszawa 2014, p.333
55. Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Mezoporowata krzemionka jako nośnik dla polimerowych katalizatorów aktywnych w reakcjach tworzenia estrów metylowych", Materiały. 2. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Wrocław 2014, pp.17-20
56. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Katalizatory polimerowe do produkcji estrów metylowych", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014, p.14 [ISBN 978-83 -7518-677 -2]
57. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Transestryfikacja glicerydów i estryfikacja kwasów tłuszczowych w obecności katalizatorów polimerowych zawierających kwasy sulfonowe", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.110 [ISBN 978-83-60514-19-1]
58. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Katalizatory polimerowe do produkcji estrów metylowych", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014 [ISBN 978-83-7518-677-2]
59. A.Karabasz, M.Bzowska, R.Mężyk-Kopeć, J.Bereta, K.Szczepanowicz "Polielektrolitowe nanokapsułki jako nośniki leków przeciwnowotworowych", Book of Abstracts. Międzyuczelniane Symp. Biotechnologiczne, Warszawa 2014, p 134
60. R.Karcz, P.Klein, V.Pashkova, S.Sklenak, J.Dedecek, "Al distribution in TNU-9 zeolite", Proceedings. 46<sup>th</sup> Symp. on Catalysis, Prague 2014, Po20
61. R.Karcz, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Aktywność katalityczna heteropolizwiązków dotowanych jonami żelaza lub kobaltu w reakcji utleniania cyklooktanu nadtlakiem wodoru", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.111 [ISBN 978-83-60514-19-1]
62. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, P.Niemiec, R.Tokarz, E.M.Serwicka "Kinetics of cyclooctane oxidation with dioxygen over heteropolyacid catalysts - mechanistic considerations", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, pp.70-71 [ISBN 978-83-60514-19-1]

63. K.Kilan, P.Nowak, P.Warszyński "Influence of different cations on properties of alginate containing multilayers for biomedical application", Book of Abstracts. COST Action CM1101 WG3 & WG4 Meeting Synthesis of advanced nano- and bio-colloidal materials with highly active surfaces, Belgrade 2014, p.19
64. A.Klimek, J.Dziadkowiec, M.Rogowska, A.Gaweł, K.Bahranowski, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Kompozyty na osnowie delaminowanych minerałów warstwowych", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.240 [ISBN 978-83-60514-19-1]
65. D.H.Knack, E.Niedziałkowska, N.Zawada, M.Szaleniec "Heterologous expression of steroid C25 dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans*", Book of Abstracts. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014, p.69 [ISBN 978-3-941492-76-9]
66. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of proton transverse relaxation times in suspension of magnetic nanoparticles", Book of Abstracts. Central European School on Physical Organic Chemistry, Przesieka 2014, p.46
67. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, W.Rojek "Physicochemical characteristics of CuO/ZrO<sub>2</sub> in reaction for obtaining dimethyl ether from CO<sub>2</sub>", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IKiFP PAN, Kraków 2014. p.131 [ISBN 978-83-60514-20-7]
68. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, W.Rojek "Physicochemical characteristics of metallic function of catalysts in reaction of hydrogenation of CO<sub>2</sub> in the way dimethyl ether", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014, p.122
69. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, R.Tokarz-Sobieraj, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, W.Rojek "Właściwości fizykochemiczne składowej metalicznej katalizatorów do uwodornienia CO<sub>2</sub> w kierunku eteru dwumetylowego", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.241 [ISBN 978-83-60514-19-1]
70. T.Korona, H.Dodziuk, A.Hesselmann, D.Rutkowska-Żbik "Endohedral complexes of fullerenes and other large complexes - what can we get from contemporary ab initio methods?", Abstracts. Polish-Taiwanese Conf. 'From Molecular Modeling to Nano-and Biotechnology', Uniwersytet Opolski, Opole 2014p.29-30
71. D.Kosior, J.Zawała, R.Todorov, D.Exerowa, P.Warszyński, K.Małysa "Foam Films and Bubble Bouncing at Free Surface of n-octanol solutions", Book of Abstracts. 15th Int. Conf. Surface Forces, Verbilki 2014, p.78
72. R.Kosydar, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Tokarz-Sobieraj, T.Szumelda "Recombination of Hydrogen and Oxygen Catalyzed by Platinum and Palladium in Safety Point of View in Nuclear Power Plants; Role of Alkali Modifiers (Li, Cs) in Catalyst Deactivation due to Water", Book of Abstracts. 2<sup>nd</sup> Int. Congr. on Energy Efficiency and Energy Related Materials ENEFM2014 (A.Y.Oral, Z.B.Bahsi, eds.), Oludeniz 2014, p.290



73. R.Kosydar, T.Szumelda, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz, E.Bielańska "Supported bimetallic PdAu, PdPt catalysts synthesised by the reverse microemulsion method in hydrogenation reactions", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014 [ISBN 978-83 -7518-677 -2]
74. R.Kosydar, T.Szumelda, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz, E.Bielańska "Nośnikowe katalizatory bimetaliczne PdAu, PdPt syntezowane metodą 'odwróconej mikroemulsji' w reakcjach uwodorniania", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.121 [ISBN 978-83-60514-19-1]
75. P.Kozyra, J.Datka, E.Broclawik "Activating charge transfer flows for hydrogen interacting with Ag<sup>+</sup>, Cu<sup>+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup> zeolite cationic sites: ETS-NOCV analysis", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014, p.496
76. K.Kruczala, M.Łukomski, Ł.Bratasz, A.Kłosowska, A.Gołąb, A.Borcuch, Z.Sojka "Mechanistic investigations into Aging of Plastic Artefacts", Programme and Abstracts Book. 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014, p.63
77. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "Functional multilayer films formed with reduced graphene oxide for advanced materials", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.288-289 [ISBN 978-83-60514-19-1]
78. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "Nanostructured multilayer polyelectrolyte films formed with reduced graphene oxide for advanced materials and sensors", Abstracts on-line. 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014, P2.27
79. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "The Modification of Multilayer Polyelectrolyte Coatings for Biomedical Applications", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014, P-130
80. M.Krzan, K.Małyś "Influence of n-alcohols chain length (C2-C10) on initial acceleration, local and terminal velocities of the rising bubbles", Book of Abstracts. 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution, Coimbra 2014, p.222 [ISBN 978-972-99512-3-7]
81. K.Kubiak, A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "QCM and streaming potential studies of PDADMAC monolayers", Abstracts on-line. 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014, p.P3.36
82. K.Kubiak, A.Michna. Z.Adamczyk, K.Jamroży "PDADMAC Deposition studies - QCM and streaming potential measurements", Book of Abstracts. IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sandomie 2014, p.36
83. K.Kubiak, Z.Adamczyk, A.Michna, K.Jamroży "Monowarstwy nanocząstek srebra – charakterystyka QCM", Materiały. Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014, p.30 [ISBN 978-83-60514-21-4]

84. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Morga, E.Kowalska "Comparative physicochemical studies of human albumin monomer and the synthetic cross-linked dimer", Book of Abstracts. FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014, p.404
85. M.Kujda, Z.Adamczyk, K.Sofińska "Globular protein monolayers on polystyrene microspheres", Abstracts on-line. 4th Int. Colloids Conf., Madrid 2014, p.P2.16
86. Ł.Kuterasiński, M.Derewiński "Rozróżnienie centrów kwasowych słabej mocy w zeolitach MFI izomorficznie podstawionych borem", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.244-245 [ISBN 978-83-60514-19-1]
87. Ł.Kuterasiński, M.Motak "The influence of the presence of NO on the catalytic activity in the reaction of VOC oxidation on layered aluminosilicates", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.125 [ISBN 978-83-60514-19-1]
88. Ł.Kuterasiński, M.Motak, P.da Costa "The investigation of modified aluminosilicates as bi-functional catalysts for VOX oxidation and DeNO<sub>x</sub> process", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.99 [ISBN 978-83-60514-20-7]
89. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Microcalorimetric study of the process of recombination of H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> under conditions similar to those of the real-life PAR reactors", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.126 [ISBN 978-83-60514-19-1]
90. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Microcalorimetric study of the process of recombination of H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> under conditions similar to those of the real-life PAR reactors", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzydroje 2014 [ISBN 978-83-7518-677-2]
91. E.Lalik, R.Kosydar, W.Rojek, J.Gurgul, T.Szumelda, M.Kołodziej, A.Drelinkiewicz "A role of alkali (Li, Cs) dopant on Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: humidity interactions during hydrogen and oxygen recombination reaction", E-Book of Abstracts. Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, IChF PAN, Warszawa 2014
92. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Struktura związków typu MeSO<sub>4</sub>(MXDA) (Me = Ni, Co, Mn) i ich charakterystyka", Materiały. 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014, p.123
93. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Hybrid organic-inorganic materials of the type MeX<sub>n</sub>(MXDA)<sub>m</sub>, Me=Ni, Co, Mn, Cd and X=I, Cl, Br", E-MRS, Conf. Materials. 2014 Fall Meeting Warszawa 2014, p.208
94. K.Luberda-Durnaś, L.Matachowski, D.Mucha, M.Oszajca, W.Łasocha "Characterization of a New Type Carrier PW<sub>12</sub>O<sub>38.5</sub> Obtained by the Annealing of H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> at 700°C", Materiały. 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014, p.124

95. K.Luberda-Durnaś, M.Mosiąlek, A.Kędra, E.Bielańska "Transport chemiczny materiałów wchodzących w skład SOFC katalizowany obecnością związków chloru", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.132 [ISBN 978-83-60514-19-1]
96. K.Luberda-Durnaś, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe typu  $CdX_2(MXDA)$  (X- Br, Cl)", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.246 [ISBN 978-83-60514-19-1]
97. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of nanoparticles containing active neuroprotective substances from nanoemulsions by phase inversion emulsification method", Abstracts on-line. 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014, P3.61
98. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, E.Bielańska, P.Warszyński "Phase inversion emulsification as a method of synthesis of nanoparticles containing neuroprotective substances for drug delivery systems", Abstracts. XIV<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1<sup>st</sup> NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014, p.72 [ISBN 978-83-60988-19-0]
99. W.Łasocha, K.Luberda Durnaś "New hybrid organic-inorganic materials, Synthesis, structure, applications", E-MRS, Conf. Materials. 2014 Fall Meeting Warszawa 2014, p.209
100. W.Łasocha, A.Szymańska, M.Oszajca, W.Nitek, K.Pamin, J.Połtowicz "Struktura, badania fizykochemiczne i katalityczne molibdenianów 4-propyloaniliny", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.247 [ISBN 978-83-60514-19-1]
101. D.Majda, M.Zimowska, K.Mlekodaj, M.Mańko, K.Tarach, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, W.Makowski, E.Serwicka "Charakterystyka materiałów mezoporowatych metodą termoporozymetrii", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.249-250 [ISBN 978-83-60514-19-1]
102. B.Matlak, A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, J.Przewoźnik, T.Ślęzak, J. Korecki "Horizontal shift of the hysteresis loop for ultrathin Fe film on MgO(001) substrate", Book of Abstracts. European Conf. Physics of Magnetism PM'14, Poznań 2014, p.176 [ISBN 83-922407-9-0]
103. M.Matczak, F.Lisiecki, P.Kuswik, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, T.Giela, J.Raabe, N.Pilet, P.Mazalski, J.Korecki, A.Maziewski, J.Dubowik, F.Stobiecki "Magnetic structure of artificial spin ice", Book of Abstracts. European Conf. Physics of Magnetism PM'14, Poznań 2014, p.190 [ISBN 83-922407-9-0]
104. A.Michalik-Zym, W.Rojek, T.Machej, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Katalizatory palladowe na nośnikach montmorillonitowych do katalitycznej rekombinacji wodoru i tlenu", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.140-141 [ISBN 978-83-60514-19-1]

105. A.Michalik-Zym, W.Rojek, T.Machej, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka, R.Tokarz-Sobieraj "Katalizatory palladowe na nośnikach montmorillonitowych do katalitycznej rekombinacji wodoru i tlenu", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014, p.57 [ISBN 978-83-7518-677-2]
106. A.Michna, Z.Adamczyk "Tworzenie i stabilność monowarstw poli(chloroku dimetylodialliloamoniowego) na micy wyznaczone *in situ* przy użyciu metody potencjału przepływu", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.297 [ISBN 978-83-931072-6-1]
107. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetics of fluorescent latex particle deposition at polyelectrolyte monolayers determined by in situ measurements in flow cell", Abstracts on-line. 4th Int. Colloids Conf., Madrid 2014, p.P3.42
108. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży, P.Batys, K.Kubiak "Kinetyka adsorpcji i desorpcji polielektrolitów kationowych", Materiały. Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014, p.25 [ISBN 978-83-60514-21-4]
109. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży, K.Kubiak "The formation and stability of PDADMAC monolayers on mica determined in situ by QCM-D and the elektrokinetic measurements", Book of Abstracts. Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014, p.101 [ISBN 978-80-85009-80-4]
110. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Morga "Kinetyka osadzania nanocząstek srebra oraz mikrosfer polistyrenowych na monowarstwach polielektrolitów", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.303 [ISBN 978-83-931072-6-1]
111. A.Michna, M.Morga Z.Adamczyk "Deposition kinetics of silver nanoparticle and polystyrene microspheres of polyelectrolyte covered surfaces", Book of Abstracts. Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014, p.163 [ISBN 978-80-85009-80-4]
112. A.Miłaszewska, T.Borowski "Insight into a reaction mechanism of acireductone dioxygenation – DFT studies for a model system", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, I KiFP PAN, Kraków 2014, p.211 [ISBN 978-83-60514-19-1]
113. L.Mokrzycki, P.Klein, V.Pashkova, Š.Sklenak, V.I.Parvulescu, N.Candu, G.Sadovska, J.Dědeček, P.Št'astny, P.Sazama, "Synthesis of Al-rich BEA zeolite and its potential for acid and redox catalysis", Proceedings. 46<sup>th</sup> Symp. on Catalysis, Prague 2014
114. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, E.Bielańska "Wytwarzanie biwarstw nanocząstek  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ag dla potencjalnych zastosowań w katalizie", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, I KiFP PAN, Kraków 2014, pp.290-291 [ISBN 978-83-60514-19-1]
115. M.Mosiąlek, M.Dudek, G.Mordarski "AC impedance study of oxygen reduction at the silver point electrode contacted doped ceria electrolyte", Book of Abstracts. Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014, pp.93-94 [ISBN 978-83-7996-029-3]

116. M.Mosiąlek, M.Dudek, G.Mordarski "Al<sub>0.04</sub>Sc<sub>0.06</sub>ZrO<sub>1.95</sub> as an electrolyte for solid oxide fuel cells. The silver electrode behavior upon the long time polarization, SEM and EIS study", Book of Abstracts. Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów2014, pp.91-92 [ISBN 978-83-7996-029-3]
117. M.Mosiąlek, A.Kędra, R.P.Socha, P.Nowak, G.Mordarski "Chemical transport by volatile chromium compounds as a reason for the corrosion in the high temperature solid oxide fuel cells", Book of Abstracts. Conf. Corrosion 2014, Gliwice 2014. p.193
118. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska "Fibrinogen Adsorption Mechanisms Revealed by Streaming Potential, AFM and Colloid Deposition Measurements", Book of Abstracts. 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution, Coimbra 2014, p.218 [ISBN 978-972-99512-3-7]
119. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk "Nanoparticle Monolayers on Polystyrene Latex Carrier Particles", Book of Abstracts. Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów2014, p.76 [ISBN 978-83-7996-029-3]
120. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Morga, M.Oćwieja "Hematite Nanoparticle Monolayers: Characterization by Colloid Deposition", Book of Abstracts. Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014, p.167 [ISBN 978-80-85009-80-4]
121. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Redox properties of modified Keggin heteropolyacids", Conference Program & Abstracts. Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014, p.P32A
122. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Electronic structure of Cu containing Dawson heteropolyacids. DFT cluster calculations", Conference Program & Abstracts. Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014, p.P32A
123. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Redox properties of Cu ions introduced in various structure of heteropolyacids. DFT cluster model studies", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IKiFP PAN, Kraków 2014. p.105 [ISBN 978-83-60514-20-7]
124. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Teoretyczny opis oddziaływania modyfikowanych układów heteropolikwasów wolframowych i molibdenowych z tlenem", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.352 [ISBN 978-83-931072-6-1]
125. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Obliczenia klasterowe DFT modyfikowanych układów Cu-HPA", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.353 [ISBN 978-83-931072-6-1]
126. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Właściwości utleniająco-redukujące modyfikowanych heteropolikwasów. Obliczenia klasterowe DFT", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, pp.212-213 [ISBN 978-83-60514-19-1]

127. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Struktura elektronowa heteropolikwasów o strukturze anionu Dawsona. Obliczenia klasterowe DFT", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.214 [ISBN 978-83-60514-19-1]
128. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Interaction of carbon dioxide with heteropolyacids modified by transition metal atoms. DFT cluster model studies", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.138 [ISBN 978-83-60514-20-7]
129. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Novel method for study of thin porous layers", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, UAM, Poznań 2014, p.94
130. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, M.Skoczek "New electrochemical method for quantitative characterization of colloidal particle monolayer", Book of Abstracts. IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sudomie 2014, p.47
131. P.Nowak "Surface Doping of TiO<sub>2</sub> by Transition Metals and the Mechanism of Charge-Transfer in Photocatalytic Systems", Program and Abstracts Book. Int. Symp. on Energy and Environmental Photocatalytic Materials, Wuhan 2014, p.31
132. P.Nowak, M.Bobruk, T.Wieczorek, W.Simka, G.Nawrat "Polarization Resistance of Corroding Magnesium Alloys", Book of Abstracts. Conf. Corrosion 2014, Gliwice 2014. p.37
133. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Osadzanie nanocząstek srebra na powierzchniach stałych – wpływ siły jonowej, pH oraz temperatury na stabilność otrzymanych monowarstw", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.293 [ISBN 978-83-60514-19-1]
134. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, A.Michna, E.Bielańska, K.Kubiak, A.Węgrzynowicz "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna nanocząstek oraz ich monowarstw", Materiały. Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014, p.18 [ISBN 978-83-60514-21-4]
135. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, B.Szaraniec, M.Kujda "Mechanizm uwalniania nanocząstek srebra w zastosowaniach praktycznych", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.296 [ISBN 978-83-931072-6-1]
136. M.Oćwieja, A.Gorczyca, M.Niemiec, Z.Adamczyk, E.Pociecha "Effect of charge-stabilized silver nanoparticles with various surface properties on physiological state of seedlings of *Triticum aestivum*", Book of Abstracts. FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014, p.622
137. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Materiały warstwowe na bazie cząstek protozeolitycznych typu MFI jako katalizatory w niskotemperaturowej reakcji izomeryzacji terpenów", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.255-256 [ISBN 978-83-60514-19-1]

138. J.Olszówka, E.Bielańska, B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka "Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kapolaktonu przy użyciu nadłtenu wodoru w obecności katalizatorów zawierających magnez", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.50 [ISBN 978-83-60514-19-1]
139. J.Olszówka, R.Karcz, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Catalytic oxidation of cyclohexanone to  $\epsilon$ -caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite catalysts", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.151 [ISBN 978-83-60514-19-1]
140. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Zimowska, D.Mucha, M.Ruggiero-Mikołajczyk "The composites containing N-doped carbon nanotubes grown on cobalt nanoparticles derived from cobalt-containing layered double hydroxides as electrocatalysts for oxygen reduction reaction", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, pp.152-153 [ISBN 978-83-60514-19-1]
141. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "The electrocatalytic properties of the multilayer polyelectrolyte films formed with Prussian Blue nanoparticles and reduced graphene oxide", Electronic Book of Abstracts. Graphene Week 2014, Goeteborg 2014
142. A.Pajor-Świerzy, K.Podgórna, L.Szyk-Warszyńska, M.Gackowski, T.Kruk, R.P.Socha, P.Warszyński "Nanostructured catalytic materials based on polyelectrolyte multilayers", Book of Abstracts. Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów2014 [ISBN 978-83-7996-029-3]
143. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, P.Warszyński "The Influence of Reduced Graphene Oxide and Conductive Polymers on the Electrocatalytic Properties of the Polyelectrolyte Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014, p.63
144. H.Pálková, Ľ.Jankovič, M.Zimowska, E.M.Serwicka, J.Madejová "Physico-chemical properties of the acid activated organo-modified clays", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.257-258 [ISBN 978-83-60514-19-1]
145. H.Pálková, Ľ.Jankovič, M.Zimowska, B.Sulikowski, E.M.Serwicka, J.Madejová "Characterization of the acid treated clays modified with quaternary phosphonium and ammonium cations", Book of Abstracts. 5<sup>th</sup> Int. Workshop on Layered Materials, Mulhouse 2014, P28
146. K.Pamin "Heteropolizwiązki jako katalizatory transformacji węglowodorów", Mater. 13. Konf. Elektroanaliza w Teorii i Praktyce, Akapit, Kraków 2014, p.36 [978-83-63663-44-5]
147. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, W.Kubiak "Badanie właściwości katalitycznych i elektrochemicznych soli kobaltowych kwasu wolframowego i molibdenowego w reakcji utleniania fenolu", Mater. 13. Konf. Elektroanaliza w Teorii i Praktyce, Akapit, Kraków 2014, p.49 [978-83-63663-44-5]

148. K.Pamin, A.Ładocha, S.Basąg, W.Kubiak, J.Połtowicz "Elektrochemiczne badanie właściwości kationowych metaloporfiryn", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.259 [ISBN 978-83-60514-19-1]
149. K.Pamin, J.Maciejewska, J.Połtowicz, S.Basąg, W.Kubiak "Synteza oraz badania fizykochemiczne serii soli żelazowych heteropolikwasów  $H_3PMO_{12}O_{40}$  i  $H_3PMO_{12}O_{40}$ ", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.260 [ISBN 978-83-60514-19-1]
150. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, S.Basąg, J.Maciejewska "Hydroxylation of phenol by hydrogen peroxide catalyzed by heteropoly compounds in presence of glycerol as green solvent", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.22 [ISBN 978-83-60514-20-7]
151. K.Pamin, J.Połtowicz, N.Wolan, A.Adamski "Synthesis and physicochemical properties of new salen ligand and salen metallocomplexes", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.261 [ISBN 978-83-60514-19-1]
152. K.Pamin, M.Prończuk, J.Połtowicz, E.M.Serwicka-Bahranowska "Polyoxometalates as catalysts for oxidation of cycloketone to cyclolactone with molecular oxygen", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.154-155 [ISBN 978-83-60514-19-1]
153. G.Para, E.Jarek, J.Łuczynski, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of ionic-nonionic surfactant mixtures at water/air interface - alkanolic acids and cleavable cationic surfactants", Book of Abstracts. 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution, Coimbra 2014 p.233 [ISBN 978-972-99512-3-7]
154. G.Para, E.Jarek, K.Szczepanowicz, J.Łuczynski, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of Esterquat Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/Water Interface", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014, PB-8
155. P.Piechota, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, W.P.Węglarz "Evaluation of the relaxation and the imaging properties of SPIO loaded nanocapsules at 9.4 T", Abstracts on-line. 45. Ogólnopolskie Semin., nt. Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2014, p.31
156. M.Piotrowski, M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Leśkiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules as a delivery system for neuroprotectants", Abstract Book. Conf. Innovations in Encapsulation 2014, London 2014, p.42
157. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-Core and Polyelectrolyte-Shell Nanocapsules as Drug Delivery System for Undecylenic Acid", Conference Proceedings. Conf. Nanocon 2014, Brno 2014 p.61 [ISBN 978-80-87294-55-0]
158. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, M.Szaleniec, M.Zimowska, P.Warszyński "Preparation of polymer hydrogels as carriers of active agent", Abstracts. XIV<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1<sup>st</sup> NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014, p.92 [ISBN 978-83-60988-19-0]



159. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, M.Szaleniec "Immobilization of (S)-1-Phenylethanol dehydrogenase (PEDH) in alginate gel", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.201 [ISBN 978-83-60514-19-1]
160. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, M.Szaleniec, J.Opalińska-Piskorz "Preparation of calcium alginate hydrogels as carriers of E.colli cells", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.202 [ISBN 978-83-60514-19-1]
161. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, M.Szaleniec, J.Opalińska-Piskorz "Preparation of polymer hydrogels as carriers of active agent and microorganisms", Abstracts on-line. 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014, P1.56
162. K.Podgórna, M.Łapczyńska, T.Kruk, M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Targeted drug delivery systems based on polyelectrolyte nanocapsules", Programme Book. Conf. BiPoCo 2014, Visegrad 2014, p.55
163. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A. Dudzik, M. Szaleniec "Encapsulation of active agents and microorganisms in polymer hydrogels", Programme Book. Conf. BiPoCo 2014, Visegrad 2014, p.53
164. M.Radoń, E.Brocławik "Metal-nitrosyl bonding in transition metal complexes: role of resonance structures and spin states", Book of Abstracts. Conference Program & Abstracts. Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014, p.116
165. A.Rafalska-Łasocha, K.Luberda-Durnaś, E.Modzelewska, A.Pawlak, W.Łasocha "XRPD Investigations of ground layers in paintings from the collection of Wilanów Palace Museum", Programme and Abstracts Book. 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014, p.43
166. A.Rafalska-Łasocha, K.Luberda-Durnaś, E.Modzelewska, A.Pawlak, W.Łasocha "Badania dyfrakcyjne warstw gruntów w obrazach z kolekcji Muzeum Pałacu w Wilanowie", Materiały. 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014, p.134
167. A.Rafalska-Łasocha, J.Szydłowska, M.Grzesiak-Nowak, D.Sarkowicz, W.Łasocha "Investigation of historic powdery pigments inherited from Henryk Siemiradzki", Programme and Abstracts Book. 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014, p.39
168. A.Rugor, A.Dudzik, M.Tataruch, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Application Potential of steroid C25 Dehydrogenase from Sterolibacterium Denitrificans", Book of Abstracts. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014, p.133 [ISBN 978-3-941492-76-9]
169. A.Rugor, A.Dudzik, N.Zawada, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Badania nad strukturą i aktywnością katalityczną Dehydrogenazy C25 steroidowej z Sterolibacterium Denitrificans", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, pp.64-65 [ISBN 978-83-60514-19-1]

170. A.Rugor, T.Janeczko, A.Dudzik, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Selective modifications of sterols performed by enzymes from *Sterolibacterium denitrificans*", Book of Abstracts. 2<sup>nd</sup> Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, IChO PAN, Warszawa 2014, p.40
171. M.Ruggiero, R.Grabowski, G.Mordarski, K.Samson, A.Żelazny, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik "Electrochemical oxidation of methane and reduction of oxygen on the electrodes in the single-chamber solid oxide fuel cell (SC SOFC)", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Environmental Catalysis, Asheville 2014, SCE-P-34
172. M.Ruggiero, A.Żelazny, M.Śliwa, R.Grabowski, K.Samson, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Influence of the metallic and acidic component modification on the activity of bifunctional catalysts for one-step DME synthesis from syngas", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Environmental Catalysis, Asheville 2014, SCE-P-35
173. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, K.Samson, D.Rutkowska-Żbik, T.Machej, R.Grabowski "Metan jako paliwo do jednokomorowego wysokotemperaturowego ogniwa paliwowego (SC SOFC) w układach Pt/YSZ/Au oraz cermet Ni /YSZ/Au", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.158-159 [ISBN 978-83-60514-19-1]
174. D.Rutkowska-Żbik, M.Buchalska, W.Macyk, "Właściwości spektroskopowe wybranych kompleksów Ti(IV) jako sensybilizatorów w układach fotokatalitycznych i ogniwach fotowoltaicznych typu DSSC", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.216 [ISBN 978-83-60514-19-1]
175. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, T.Korona, Ł.Orzeł, M.Witko "How can DFT methods enhance applications of metalloporphyrins?", Mater. Central European Symp. on Theoretical Chemistry CESTC 2014, Nagyborzsony 2014
176. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Metalloporphyrins as Bio-Mimetic Oxidation Catalysts: Joint Theoretical and Experimental Studies", Programme and Abstracts Book. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014, p.53
177. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Kwantowo-chemiczne badania właściwości układów porfiryńowych i im pokrewnych", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.342 [ISBN 978-83-931072-6-1]
178. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, Ł.Orzeł, M.Świrski, A.Kania, G.Stochel "Czynniki warunkujące transmetalację metalloporfiryń", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.217 [ISBN 978-83-60514-19-1]
179. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, R.Tokarz-Sobieraj, J.Korecki "Jak nauczać nanotechnologii?", Streszczenia. 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014, p.399 [ISBN 978-83-931072-6-1]
180. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanisms of Nanoparticle Monolayer Formation on Colloid Carrier Particles", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.263 [ISBN 978-83-60514-19-1]

181. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Colloid Carrier Particles, Abstracts on-line. 4th Int. Colloids Conf., Madrid 2014, p.P2.27
182. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Colloid Particles", Book of Abstracts. Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014, p.166 [ISBN 978-80-85009-80-4]
183. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M. Wasilewska "Conformations of Fibrinogen Monolayers Determined by the Colloid Deposition Method", Abstracts on-line. 4th Int. Colloids Conf., Madrid 2014, p.P2.26
184. K.Samson, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, M.Lachowska, M.Śliwa, Ł.Mokrzycki, A.Kornas "Wpływ nośnika na właściwości fizykochemiczne i katalityczne katalizatorów Cu-Ag/nośnik tlenkowy do reakcji selektywnej hydrogenolizy glicerolu", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.163 [ISBN 978-83-60514-19-1]
185. E.M.Serwicka, K.Bahranowski "Catalysts derived from layered minerals for abatement of volatile organic compounds", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IKiFP PAN, Kraków 2014. p.7 [ISBN 978-83-60514-20-7]
186. E.M.Serwicka, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.Bielańska, A.Klimek, A.Gaweł, K.Bahranowski "Hydrotalcite/montmorillonite nanocomposite", Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014, p.276
187. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński "Understanding cholesterol effect on biological membranes: cholesterol-phospholipid interactions at high cholesterol concentration", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, UAM, Poznań 2014, p.111
188. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Quantitative characterization of model prostatesome membrane - molecular dynamic simulations", Book of Abstracts. IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sudomie 2014, p.55
189. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, M.Lipiński, P.Warszyński "Metallic and bimetallic catalysts for silicon etching", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.164 [ISBN 978-83-60514-19-1]
190. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, M.Lipiński, P.Warszyński "Metallic and bimetallic catalysts for silicon etching", Book of Abstracts. Conf. Organic photovoltaics-from molecules to solarcells, Białystok 2014, P.15
191. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, L.Szyk-Warszyńska, M.Lipiński, P.Warszyński "The morphology and surface chemistry of silicon etched with bimetallic catalysts", Book of Abstracts. 30<sup>th</sup> European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014, p.523

192. R.P.Socha, M.Ślęzak, M.Szczepanik-Ciba, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, J.Korecki, "CO oxidation on MnO/Pt(111) studied by XPS, TPD, XAS and PEEM", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.165 [ISBN 978-83-60514-19-1]
193. R.Socha, M.Ślęzak, M.Szczepanik-Ciba, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "CO oxidation on MnO/Pt(111) studied by XPS, TPD, XAS and PEEM", Book of Abstracts. European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014, p.193
194. K.Sofińska, Z.Adamczyk, M.Kujda "Monolayers of human albumins on colloidal carrier particles and flat surfaces: thorough physicochemical characteristics in terms of electrokinetic methods", Book of Abstracts. FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014, p.413
195. N.Spiridis, K.Freindl, E.Madej, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "Phase composition and transformations in ultrathin iron oxide films on Pt(111)", Book of Abstracts. European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014, p.253
196. Z.Starowicz, K.Berent, R.P.Socha, J.Dziedzic, M.Lipiński "Photochemical deposition of the plasmonic silver structures", Conference Materials. E-MRS 2014 Spring Meeting Lille 2014, I.P1.30.
197. Z.Starowicz, G.Kulesza, M.Lipiński, A.Kędra, R.P.Socha "Light scattering silver nanoparticles based plasmonic structure for silicon PV - properties and deposition process", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. PhD Seminar, Dresden 2014, p. 88.
198. A.Śtepniewski, E.Broclawik, K.Góra-Marek, M.Radoń "Modification of cobalt sites in zeolites by coadsorption of electron donor/acceptor ligands and its impact on the strength of NO bond", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014, P.52
199. A.Śtepniewski, E.Broclawik, K.Góra-Marek, M.Radoń "Electron transfer processes crucial for coadsorption of NO and small ligands on cobalt sites in zeolites", Conference Program & Abstracts. Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014, p.128
200. A.Śtepniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "The influence of ammonia molecules on electron transfer processes imposed by the interaction between NO and cobalt sites in zeolites: SR-NOCV analysis of the Co-NO bond", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.219 [ISBN 978-83-60514-19-1]
201. A.Śtepniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "Modification of Cobalt Sites in Zeolites by Coadsorption of Electron Donor/Acceptor Ligands and its Impact on the Strength of NO Bond", E-Book of Abstracts. Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, IChF PAN, Warszawa 2014
202. A.Śtepniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "Influence of Ammonia Co-adsorption on Spin and Electron Transfer for Co(II) Sites in Zeolites: IR Studies on NO Activation and DFT Modeling", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014, p.200
203. M.Szaleniec, P.Dyshlovenko, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Can we Describe Protein Adsorption in Terms of Electrostatic Interactions?", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014, p.64

204. M.Szaleniec, A.Rugor, J.Heider, T.Borowski, M.Witko "Monomolybdenum enzymes hydroxylating hydrocarbons – isotope experiments and modeling of mechanism", Programme and Abstracts Book. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014, p.61
205. M.Szaleniec, A.Rugor, E.Niedziałkowska, A.Dudzik, M.Tataruch, D.Knack "Biocatalytic Hydroxylation of Cholesterol and Its Derivatives", E-Abstracts. ", Conf. Life Science Open Space 2014, Kraków 2014
206. M.Szczepanik-Ciba, M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Pilet, J.Raabe, N.Spiridis, J.Korecki "LEEM/PEEM investigation of epitaxial metal and oxide manganese nanostructures on W(110)", Book of Abstracts. European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014, p.205
207. K.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as an Anticancer Drug Carriers", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014, PB-26
208. K.Szczepanowicz A.Karabasz, M.Bzowska, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules for targeted delivery of anticancer drugs", Abstracts Book. Conf. Innovations in Encapsulation 2014, London 2014, p.41
209. K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, M.Dziedzicka-Wasylewska, P.Warszyński "Encapsulated emulsion droplets as drug carriers", Book of Abstracts. Conf. Smart and Green Interfaces, Marseille 2014, O-10
210. K.Szczepanowicz, P.Piechota, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules containing iron oxides as imaginable magnetically responsive drug delivery system", Conference Proceedings. Conf. Nanocon 2014, Brno 2014 [ISBN 978-80-87294-55-0]
211. K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, K.Podgórna, M.Łapczyńska, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Multiwarstwy polielektrolitów w układach dostarczania leków", Materiały. Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014, p.20 [ISBN 978-83-60514-21-4]
212. K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Magnetically Responsive Polyelectrolyte Nanocapsules", Abstracts on-line. 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014, PB-26
213. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, E.Bielańska "Wpływ zawartości Au w katalizatorach bimetalicznych PdAu/C, na selektywność w reakcji uwodorniania" Materiały. 2. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Wrocław 2014
214. A.Szymańska, W.Łasocha, K.Pamin, J.Połtowicz "Molybdenum catalysts for cycloalkanes oxidation with molecular oxygen", Book of Abstracts. 21<sup>st</sup> Int. Congr. of Chemical and Process Engineering CHISA 2014, Prague 2014, P3.63
215. A.Szymańska, W.Nitek, M.Oszajca, W.Łasocha, K.Pamin, J.Połtowicz, R.Karcz "Influence of polymolbdates structure on their activity in oxidation of cycloalkanes with molecular oxygen", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.167-168 [ISBN 978-83-60514-19-1]

216. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, P.Warnicke, C.Quitmann, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", Book of Abstracts. LEEM/PEEM 9<sup>th</sup> Workshop, Forschungszentrum Jülich GmbH, Berlin 2014 p.118
217. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, P.Warnicke, C.Quitmann, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", Abstracts. 12<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science ISSRNS-12, Warszawa 2014, p.64
218. M.Śliwa, R.Grabowski, A.Żelazny, A.Kornas, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.-F.Paul, D.Rutkowska-Żbik "Influence of polymorphic ZrO<sub>2</sub> phases and the copper electronic state on the activity of Cu/ZrO<sub>2</sub> catalysts in the hydrogenation of CO<sub>2</sub> to methanol", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IKiFP PAN, Kraków 2014. p.63 [ISBN 978-83-60514-20-7]
219. M.Śliwa, A.Żelazny, A.Kornas, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski "Investigation of hybrid catalysts deactivation in syngas to dimethyl ether process", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IKiFP PAN, Kraków 2014. p.143 [ISBN 978-83-60514-20-7]
220. S.Świątek, M.Ćwięka, K.Bieda, B.Jachimska "Hybrydowe warstwy polielektrolitowe do aplikacji biomedycznych", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.298 [ISBN 978-83-60514-19-1]
221. M.Tataruch, M.Szaleniec, A.Bogusławska, P.Nowak, J.Bryjak, J.Heider "Application studies on synthesis of chiral alcohols by ethylbenzene dehydrogenase", Book of Abstracts. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014, p.170 [ISBN 978-3-941492-76-9]
222. M.Tataruch, M.Szaleniec, P.Nowak, A.Czerniak, J.Bryjak, J.Heider "Application studies on synthesis of chiral alcohols by ethylbenzene dehydrogenase", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, pp.205-206 [ISBN 978-83-60514-19-1]
223. M.Tatko, M.Mosiałek, M.Dudek, A.Kędra, P.Nowak, E.Bielańska "New Cathode Materials Composed of Ag, Sm<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>, and La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>FeO<sub>3</sub> for Solid Oxide Fuel Cells", Abstracts Book. 11<sup>th</sup> Int. Symp. Systems with Fast Ionic Transport, Gdańsk 2014, p.90
224. M.Tatko, M.Mosiałek, M.Dudek, G.Mordarski, E.Bielańska, J.Wojewoda-Budka "Catalytic reduction of oxygen on composite material Ba<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>Co<sub>0.8</sub>Fe<sub>0.2</sub>O<sub>3</sub>-Ag", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2014, p.179 [ISBN 978-83-60514-19-1]
225. M.Tatko, M.Mosiałek, M.Dudek, P.Nowak, A.Kędra, M.Zimowska "New composite material Sm<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>-La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>FeO<sub>3</sub> for solid oxide fuel cells", Book of Abstracts. Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014, pp.95-96 [ISBN 978-83-7996-029-3]

226. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański, M.Witko "Sole glinowe, galowe i indowe heteropolikwasów. Obliczenia DFT vs. badania katalityczne", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.220 [ISBN 978-83-60514-19-1]
227. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś. M.Witko, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Al, Ga, In salts of heteropolyacids. DFT modeling vs. catalytic test", Programme and Abstracts Book. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014, p.117
228. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Bielański "Generation of acidic sites in Al, Ga, In salts of molybdenum and tungsten heteropolyacids. DFT modeling and catalytic tests", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.64 [ISBN 978-83-60514-20-7]
229. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Bielański "Generation of acidic sites in Al, Ga, In salts of molybdenum and tungsten heteropolyacids. DFT modeling and catalytic tests", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Panonnian Symp. on Catalysis, Trest 2014, p.58
230. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Teoretyczny opis heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014, pp.60-61 [ISBN 978-83 -7518-677 -2]
231. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "DFT Cluster Calculations of modified Cu-HPA", Programme and Abstracts Book. Proc. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014, p.118
232. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "DFT modeling of tungsten heteropolyacids modified by Cu ion(s)", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Panonnian Symp. on Catalysis, Trest 2014, P.51
233. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Keggin anion modified by cations from first row transition metal", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Panonnian Symp. on Catalysis, Trest 2014, P.50
234. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, P.Niemiec "Sposób koordynacji jonów miedziowych w różnych rozpuszczalnikach", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.221 [ISBN 978-83-60514-19-1]
235. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, P.Niemiec "Type of coordination of Cu<sup>2+</sup> and Cu<sup>1+</sup> ions in different solvents. DFT modeling", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.144 [ISBN 978-83-60514-20-7]
236. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda "Oddziaływanie małych klastrów metalicznych z wodą i nośnikami. Obliczenia teoretyczne DFT vs eksperyment", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.222 [ISBN 978-83-60514-19-1]
237. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda "Opis oddziaływania monocentrowych i bimetalicznych klastrów Pd, Pt, Au z wodą i wybranymi nośnikami. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment", Materiały. Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014, pp.58-59 [ISBN 978-83-7518-677-2]

238. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda, R.Kosydar "Interaction of mono- and bi- metallic nanoclusters with the water molecule. DFT cluster model studies vs. experiment", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.145 [ISBN 978-83-60514-20-7]
239. A.Węgrzynowicz, M.Oćwieja, P.Michorczyk, Z.Adamczyk "Chromium - free catalyst based on hematite nanopowder for hydrogen production in water-gas shift (WGS) reaction", Book of Abstracts. Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów2014, p.77 [ISBN 978-83-7996-029-3]
240. D.Wilgocka-Ślęzak, M.Szczepanik-Ciba, M.Ślęzak, T.Giela, N.Pilet, J.Raabe, N.Spiridis, J.Korecki "LEEM/PEEM investigation of epitaxial metal and oxide manganese nanostructures on W(110)", Book of Abstracts. LEEM/PEEM 9<sup>th</sup> Workshop, Forschungszentrum Jülich GmbH, Berlin 2014 p.119
241. T.Wilkosz, A.Weselucha-Birczyńska, J.Dutkiewicz, E.Bielańska, J.Camra, L.Lityńska-Dobrzyńska, P.Kornelak, M.Najbar "Rola powinowactwa do tlenu i temperatur Tammanna metali w projektowaniu monolitycznych katalizatorów środowiskowych na folii ze stali kwasoodpornej, do redukcji tlenków azotu", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.21 [ISBN 978-83-60514-19-1]
242. T.Wilkosz, A.Weselucha-Birczyńska, J.Dutkiewicz, E.Bielańska, M.Najbar "Badanie aktywności monolitycznych katalizatorów na stali kwasoodpornej z tlenkowymi fazami aktywnymi, w rozkładzie NO, w warunkach gazów odlotowych elektrowni węglowej", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.185 [ISBN 978-83-60514-19-1]
243. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Formation of supported lipid bilayer on modification solid substrates", Abstracts on-line. 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014, 0362
244. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of cushion material and preparation conditions on the formation supported lipid bilayers", Abstracts. XIV<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1<sup>st</sup> NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014, p.150 [ISBN 978-83-60988-19-0]
245. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of interactions of congo red with single-walled carbon nanotubes", Book of Abstracts. Central European School on Physical Organic Chemistry, Przesieka 2014, p.71
246. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "How subtle differences in enzyme structures affect the reaction outcome? Theoretical studies on HMS and HPPD", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.66 [ISBN 978-83-60514-19-1]
247. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "How subtle differences in enzyme structures affect the re action outcome? Theoretical studies on HMS and HPPD", Conference Program & Abstracts. Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014, p.132



248. M.Zajac, A.Bianco, C.J.Bocchetta, E.Busetto, P.Goryl, J.Korecki, M.Sikora, M.J.Stankiewicz, M.Ślęzak, A.I.Wawrzyniak, Ł.Żytniak "First bending magnet beamline at Solaris", Abstracts. 12<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science ISSRNS-12, Warszawa 2014, p.63
249. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Air at hydrophobic solid surfaces and kinetics of the bubble collision", Book of Abstracts. 15th Int. Conf. Surface Forces, Verbilki 2014, p.79
250. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Influence of surface-active substance on kinetics of the bubble attachment to hydrophobic solids", Abstracts. XIVth Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1st NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014, p.151 [ISBN 978-83-60988-19-0]
251. J.Zawała, D.Kosior, A.Niecikowska, K.Małyś "Surface charge and kinetics of the three-phase contact formation at hydrophobic and hydrophilic solids", Book of Abstracts. 15th Int. Conf. Surface Forces, Verbilki 2014, p.23
252. W.Zieliński, K.A.Wilk, G.Para, E.Jarek, K.Ciszewski, J.Palus, P.Warszyński "Synthesis and surface properties of new antielectrostatic soft cationic dichain surfactants", Book of Abstracts. 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution, Coimbra 2014 [ISBN 978-972-99512-3-7]
253. M.Zimowska, J.Gurgul, K.Łątka, J.Kryściak-Czerwenka, D.Napruszewska, R.P.Socha "Characterization of iron functionalized porous clay heterostructures derived from Laponite", Book of Abstracts. V<sup>th</sup> Int. Workshop on Layered Materials, Mulhouse 2014, P-29
254. M.Zimowska, J.Gurgul, J.Olszówka, K.Łątka "Incorporation of tin into porous clay heterostructure: FTIR and Mössbauer spectroscopy comparative study", Book of Abstracts. 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2014, p.278-279 [ISBN 978-83-60514-19-1]
255. M.Zimowska, J.Gurgul, J.Olszówka, K.Łątka, R.P.Socha "Characterization of functionalized PCH composites derived from laponite", Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014, p.107
256. M.Zimowska, J.Gurgul, K.Łątka, Z.Olejniczak "Structural rearrangements of iron in Fe-PCH composites derived from Laponite – FTIR and Mössbauer spectroscopy comparative study", Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014, p.228
257. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero, M.Śliwa, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Selective hydrogenolysis of glycerol to 1,2-propanediol on the catalysts containing Cu-Ag phase deposited on oxide supports (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>)", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Environmental Catalysis, Asheville 2014, GC-P-32
258. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Kornas, M.Lachowska "Hydrogenolysis of glycerol to propylene glycol over Cu-Ag/oxides catalysts – role of the support and reaction conditions", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, IkiFP PAN, Kraków 2014. p.146 [ISBN 978-83-60514-20-7]

259. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Kornas, M.Lachowska "Influence of the carrier on physicochemical and catalytic properties of Cu-Ag/oxide catalysts for selective hydrogenolysis of glycerol to propylene glycol", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014, p.61
260. P.Żeliszewska, A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk "Conformations of fibrinogen monolayers on latex particles: role of pH of adsorption", Abstracts on-line. 4th Int. Colloids Conf., Madrid 2014, p.P2.34
261. P.Żeliszewska, A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk "Human Fibrinogen Adsorption on Latex Particles at pH 7.4 Studied by Electrophoretic Mobility and AFM Measurements", Book of Abstracts. Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014, p.146 [ISBN 978-80-85009-80-4]

## **KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]**

1. "XLVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, XVLI Polish Annual Conference on Catalysis, 19-21.03.2014, Kraków" (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków, 2014, pp. 318 [ISBN 978-83-60514-19-1]
2. "International Symposium on Air & Water Pollution Abatement Catalysis, 1-5.09.2014 Kraków" (A.Drzewiecka-Mastuszek, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2014, pp.161 [ISBN 978-83-60514-20-7]
3. "Seminarium Sprawozdawcze, Kraków 21.10.2014, Funkcjonalne nano i mikrocząstki – synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach (FUNANO), POIG.01.01.02-12-028/09" (Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2014, pp. 100 [ISBN 978-83-60514-21-4]

## **OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ**

### **ZGŁOSZENIA PATENTOWE**

1. T.Brunschwiler, B.Burg, J.Zuercher, R.Dixon, H.Kristiansen, P.Warszyński "Bridging Arrangement, Microelectronic Component and Method, for Manufacturing a Bridging arrangement", GB Patent Application, GB1419268.6 (29.10.2014)
2. P.Panek, R.P.Socha, K.Drabczyk, P.Zięba "Komponent pasty przewodzącej i pasta przewodząca zwłaszcza do wytwarzania elektrod ogniw słonecznych", zgłoszenie patentowe RP, P.409794 (14.10.2014)



## UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH 2014

### WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z.Adamczyk "Nanoparticle and protein adsorption guest for a universal mechanism", Conf. Nanotechnology: Research and Development, Vilnius 2014
2. Z.Adamczyk "Protein Adsorption - Mythology and (or) Science", 5<sup>th</sup> US-Poland Workshop: Thermodynamics of Complex Fluids and Interfaces, Warszawa 2014
3. Z.Adamczyk, M.Morga, A.Michna "Adsorption Mechanisms of Polyelectrolytes and Proteins", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014
4. T.Borowski "Spin states and reaction mechanisms of mononuclear non-heme metalloenzymes - computational studies", COST Action CM1305 First Scientific Workshop, Girona 2014
5. E.Broclawik, M.Radoń, T.Borowski, A.Stępniewski "Spin- and electron density redistribution upon binding of noninnocent ligand by iron and related TM sites in enzymatic environment", Conf. From Computational Biophysics to Systems Biology CBSB14, Gdańsk 2014
6. E.Broclawik, A.Stępniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń "Donor modifiers of Co(II) active sites: explicit spin and charge transfer channels for NO - NH<sub>3</sub> co-adsorption in zeolites", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014
7. A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Kosydar, W.Rojek, J.Gurgul, T.Szumelda, M.Kołodziej, R.Tokarz-Sobieraj "Kataliza – bezpieczeństwo reaktorów nuklearnych", Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, Falenty 2014
8. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul "Investigations into palladium-polypyrrole nanocomposites for reduction of oxygen in acid medium", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
9. B.Jachimska "A comprehensive study of phenomenon of the proteins adsorption", MP-SPR Scientific Meeting Europe, Amsterdam 2014
10. B.Jachimska "Structural rearrangements of globular protein on solid surface", MP-SPR Scientific Meeting Europe, Amsterdam 2014
11. B.Jachimska, K.Bieda, M.Ćwiąka, "Structure of adsorbed polyelectrolyte (dendrymer, protein) monolayers investigated by MP-SPR", MP-SPR Scientific Meeting in China, Beijing 2014
12. T.Korona, H.Dodziuk, A.Hesselmann, D.Rutkowska-Żbik "Endohedral complexes of fullerenes and other large complexes - what can we get from contemporary ab initio methods?", Polish-Taiwanese Conf. 'From Molecular Modeling to Nano-and Biotechnology', Opole 2014
13. W.Łasocha, K.Luberda Durnaś "New hybrid organic-inorganic materials, Synthesis, structure, applications", E-MRS, 2014 Fall Meeting Warszawa 2014

14. W.Łasocha, A.Szymańska, M.Oszajca, G.Appleby, K.Pamin, J.Połtowicz "Polymolybdates and Peroxomolybdates: Candidates for Catalysts in Industry", 23<sup>th</sup> Congr. of Int. Union of Crystallography, Montreal 2014
15. M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, R.P.Socha "Silver migration caused by polarization at the Ag|Al<sub>0.04</sub>Sc<sub>0.06</sub>Zr<sub>0.9</sub>O<sub>1.95</sub> interface" Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów2014
16. P.Nowak "Surface Doping of TiO<sub>2</sub> by Transition Metals and the Mechanism of Charge-Transfer in Photocatalytic Systems", Int. Symp. on Energy and Environmental Photocatalytic Materials, Wuhan 2014
17. A.Pajor-Świerzy, K.Podgórna, L.Szyk-Warszyńska, M.Gackowski, T.Kruk, R.P.Socha, P.Warszyński "Nanostructured catalytic materials based on polyelectrolyte multilayers", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów2014
18. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, T.Korona, Ł.Orzeł, M.Witko "How can DFT methods enhance applications of metalloporphyrins?", Central European Symp. on Theoretical Chemistry CESTC 2014, Nagyborzsony 2014
19. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Metalloporphyrins as Bio-Mimetic Oxidation Catalysts: Joint Theoretical and Experimental Studies", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014
20. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Kwantowo-chemiczne badania właściwości układów porfirynowych i im pokrewnych", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
21. E.M.Serwicka, K.Bahranowski "Catalysts derived from layered minerals for abatement of volatile organic compounds", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
22. M.Szaleniec, M.Tataruch, T.Borowski, J.Bryjak, J.Heider "Synthesis of chiral alcohols by ethylbenzene dehydrogenase – from modeling to application", 2<sup>nd</sup> Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, Warszawa 2014

## REFERATY I KOMUNIKATY

1. P.Batys, K.Jamroży, A.Michna, Z.Adameczyk "Konformacje polielektrolitów w roztworach", Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014
2. P.Batys, M.Nosek, P.Weroński "Application of Monte Carlo method for adsorption process simulation", CCP5 Summer School 2014 Methods in Molecular Simulations, Manchester 2014
3. P.Batys, P.Weroński "Transport properties of layer-by-layer assemblies of spherical particles at solid/liquid interface", IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sudomie 2014

4. M.Bobruk, M.Kopeć, T.Chmielewski, P.Nowak "Stoichiometry of copper sulfides and the electrosorption of xanthates", Mineral Engineering Conf. MEC 2014, Istebna 2014
5. T.Borowski "Quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) methods – foundations & examples of bio-applications", 3<sup>rd</sup> Int. Conf. of Biophysics Students, Kraków 2014
6. T.Borowski, A.Wójcik, A.Mińczewska "Reaction mechanisms of selected mononuclear non-heme oxygenases - insights from computational studies", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014
7. M.Dudek, P.Tomczyk, M.Mosiąlek, S.Żurek, A.Raźniak "Zastosowanie elektrod punktowych do badań procesów elektrochemicznych w stałotlenkowych ogniwach paliwowych", 13. Konf. Elektroanaliza w Teorii i Praktyce, Kraków 2014
8. K.Durczyk, B.Sulikowski "Ultrastabilne formy zeolitu typu Y: otrzymywanie i właściwości fizykochemiczne", 3. Ogólnopolska Konferencja 'Pomiędzy Naukami', Zjazd Fizyków i Chemików, Chorzów 2014
9. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic degradation of the humic substances enhanced by chemical oxidation", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
10. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Dealuminiowany i desilikowany naturalny klinoptylolit w świetle badań metodą spektroskopii NMR w ciele stałym", 3. Ogólnopolska Konferencja 'Pomiędzy Naukami', Zjazd Fizyków i Chemików, Chorzów 2014
11. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Właściwości fizykochemiczne modyfikowanych klinoptylolitów ze złóż naturalnych", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014]
12. D.Fiksak, A.Marczakiewicz-Lusting, B.Jachimska, G.Heba, D.Dudek, J.Hartwich "The impact of triglyceride-rich lipoproteins (TRL) on plasma modified protein evaluation", 9<sup>th</sup> Białystok Int. Medical Congr. for Young Scientists, Białystok 2014
13. 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", LEEM/PEEM 9<sup>th</sup> Workshop, Berlin 2014
14. J.M.del Hoyo-Meléndez, M.Matosz, Ł.Bratasz "XRF analysis of metallic cultural heritage objects from the National Museum in Krakow", 3<sup>rd</sup> Int. Congr. Chemistry for Cultural Heritage CHEMCH 2014, Wien 2014
15. B.Jachimska, K.Bieda "Structure of Adsorbed Dendrimer Monolayers Investigated by Combining QCM-D and MP-SPR Techniques", Symp. of the Analytical Division of SPQ-2014, Coimbra 2014
16. Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Mezoporowata krzemionka jako nośnik dla polimerowych katalizatorów aktywnych w reakcjach tworzenia estrów metylowych", 2. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Wrocław 2014

17. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, P.Niemiec, R.Tokarz, E.M.Serwicka "Kinetics of cyclooctane oxidation with dioxygen over heteropolyacid catalysts - mechanistic considerations", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
18. K.Kilan, P.Nowak, P.Warszyński "Influence of different cations on properties of alginate containing multilayers for biomedical application", COST Action CM1101 WG3 & WG4 Meeting Synthesis of advanced nano- and bio-colloidal materials with highly active surfaces, Belgrade 2014
19. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of proton transverse relaxation times in suspension of magnetic nanoparticles", Central European School on Physical Organic Chemistry, Przesieka 2014
20. K.P.Korona, S.Grankowska, A.Iwan, T.Korona, D.Rutkowska-Żbik, M.Kamińska "Optical spectroscopy of polyazomethine-PCBM nanostructures", 13. Krajowa Konf. Elektroniki, Darłówko 2014
21. R.Kosydar, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Tokarz-Sobieraj, T.Szumelda "Recombination of Hydrogen and Oxygen Catalyzed by Platinum and Palladium in Safety Point of View in Nuclear Power Plants; Role of Alkali Modifiers (Li, Cs) in Catalyst Deactivation due to Water", 2<sup>nd</sup> Int. Congr. on Energy Efficiency and Energy Related Materials ENEFM2014, Oludeniz 2014
22. K.Kruczala, M.Łukomski, Ł.Bratasz, A.Kłosowska, A.Gołąb, A.Borcuch, Z.Sojka "Mechanistic investigations into Aging of Plastic Artefacts", 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014
23. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "The Modification of Multilayer Polyelectrolyte Coatings for Biomedical Applications", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
24. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, V.Ulaganatha, M.Lotfi, A.Javadi, R. Miller "Stable and biodegradable aqueous particle laden biofoams for medical, cosmetic or industrial applications", 10<sup>th</sup> European Conf. on Foams and Applications - Eurofoam 2014, Thessaloniki 2014
25. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, V.Ulaganatha, M.Lotfi, A.Javadi, R. Miller "Stable and biodegradable aqueous foams for industrial and biomedical applications", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014
26. K.Kubiak, Z.Adamczyk, A.Michna, K.Jamroży "Monowarstwy nanocząstek srebra – charakterystyka QCM", Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014
27. K.Kubiak, A.Michna. Z.Adamczyk, K.Jamroży "PDADMAC Deposition studies - QCM and streaming potential measurements", IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sandomie 2014
28. P.Kwolek, M.Łapczyńska, K.Szaciłowski "Hydrothermal synthesis and properties of lead molybdate", PhoBiA Annual Nanophotonics Int. Conf. PANIC 2014, Wrocław 2014

29. M.Łukomski, L.Krzemień "Mechanism of craquelure pattern formation on panel paintings", 16<sup>th</sup> Int. Conf. on Experimental Mechaanics ICEM16, Cambridge 2014
30. M.Łukomski, L.Krzemień, A.Kijowska, B.Mierzejewska "Analysis of the state of preservation of paintings from Faras using interferometric methods", 14. Konf. Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2014
31. A.Marczakiewicz-Lusting, B.Jachimska, D.Fiksak, G.Heba, D.Dudek, J.Hartwich "Molecular imaging of triglyceride-rich lipoproteins. Clinical application", 9<sup>th</sup> Białystok Int. Medical Congr. for Young Scientists, Białystok 2014
32. A.Michna, Z.Adamczyk "Tworzenie i stabilność monowarstw poli(chlorku dimetylodialliloamoniowego) na micy wyznaczone *in situ* przy użyciu metody potencjału przepływu", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
33. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży, P.Batys, K.Kubiak "Kinetyka adsorpcji i desorpcji polielektrolitów kationowych", Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014
34. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży, K.Kubiak "The formation and stability of PDADMAC monolayers on mica determined *in situ* by QCM-D and the elektrokinetic measurements", Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014
35. A.Miłaczewska, T.Borowski "Insight into a reaction mechanism of acireductone dioxygenation – DFT studies for a model system", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
36. A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Strojecki "Zabrudzenia wewnątrz zabytkowych kościołów – źródła pyłów, ich przenoszenie i osiadanie", 14. Konf. Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2014
37. M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, R.P.Socha "Silver migration caused by polarization at the Ag|Al<sub>0.04</sub>Sc<sub>0.06</sub>Zr<sub>0.90</sub>O<sub>1.95</sub> interface", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
38. M.Nosek, P.Batys, P.Weroński, M.Skoczek "New electrochemical method for quantitative characterization of colloidal particle monolayer", IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sudomie 2014
39. P.Nowak, M.Bobruk, T.Wieczorek, W.Simka, G.Nawrat "Polarization Resistance of Corroding Magnesium Alloys", Conf. Corrosion 2014, Gliwice 2014
40. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, A.Michna, E.Bieleńska, K.Kubiak, A.Węgrzynowicz "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna nanocząstek oraz ich monowarstw", Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Kraków 2014
41. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, B.Szaraniec, M.Kujda "Mechanizm uwalniania nanocząstek srebra w zastosowaniach praktycznych", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014



42. M.Oćwieja, A.Gorczyca, E.Pociecha "Wpływ nanocząstek srebra na rozwój i funkcjonowanie wybranych mikro- i makroorganizmów", Konf. Małopolski Festiwal Innowacji, Kraków 2014
43. J.Olszówka, E.Bielańska, B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka "Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kaprolaktonu przy użyciu nadlitenku wodoru w obecności katalizatorów zawierających magnez", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
44. J.Olszówka, R.Karcz, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Catalytic oxidation of cyclohexanone to  $\epsilon$ -caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite catalysts", 12<sup>th</sup> Chemistry Conf. for Young Scientists, Blankenberge 2014
45. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, P.Warszyński "The Influence of Reduced Graphene Oxide and Conductive Polymers on the Electrocatalytic Properties of the Polyelectrolyte Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
46. K.Pamin "Heteropolizwiązki jako katalizatory transformacji węglowodorów", 13. Konf. Elektroanaliza w Teorii i Praktyce, Kraków 2014
47. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, S.Basąg, J.Maciejewska "Hydroxylation of phenol by hydrogen peroxide catalyzed by heteropoly compounds in presence of glycerol as green solvent", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
48. P.Panek, K.Drabczyk, R.P.Socha, P.Zięba "Wpływ tylnej warstwy typu p+ na parametry ogniwa słonecznego na bazie krzemu typu p na podstawie obliczeń wykonanych programem komputerowym PC-1D", 5<sup>th</sup> Symp. on Photovoltaics and Transparent Electronics - Development Perspectives, Świeradów-Zdrój 2014
49. G.Para, E.Jarek, J.Łuczyński, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of ionic-nonionic surfactant mixtures at water/air interface - alkanolic acids and cleavable cationic surfactants", COST Action CM1101 WG1, WG3, WG5 & WG6 Meeting Particles at Liquid and Solid Interfaces: Fundamentals and Applications, Genoa 2014
50. G.Para, E.Jarek, J.Łuczynski, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of ionic-nonionic surfactant mixtures at water/air interface - alkanolic acids and cleavable cationic surfactants", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014
51. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-Core and Polyelectrolyte-Shell Nanocapsules as Drug Delivery System for Undecylenic Acid", Conf. Nanocon 2014, Brno 2014
52. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "Prediction of the stereochemical effects in the ligand-receptor interactions: metadynamics simulations", Conf. Bioinformatics in Toruń BIT14, Toruń 2014
53. W.Płaziński, M.Drach "Carbohydrate ring puckering: transition path sampling analysis", 27<sup>th</sup> Int. Carbohydrate Symp., Bangalore 2014

54. A.Rugor, A.Dudzik, N.Zawada, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Badania nad strukturą i aktywnością katalityczną Dehydrogenazy C25 steroidowej z Sterolibacterium Denitrificans", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
55. A.Rugor, T.Janeczko, A.Dudzik, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Selective modifications of sterols performed by enzymes from Sterolibacterium denitrificans", 2<sup>nd</sup> Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, Warszawa 2014
56. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Quantitative characterization of model prostatesome membrane - molecular dynamic simulations", IX<sup>th</sup> Summer School for Graduate Students: Interfacial Phenomena in Theory and Practice, Sudomie 2014
57. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, L.Szyk-Warszyńska, M.Lipiński, P.Warszyński "The morphology and surface chemistry of silicon etched with bimetallic catalysts", 30<sup>th</sup> European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014
58. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, L.Szyk-Warszyńska, M.Lipiński, P.Warszyński "The studies on application of the metallic and bimetallic catalysts for silicon etching", 5<sup>th</sup> Symp. on Photovoltaics and Transparent Electronics - Development Perspectives, Świeradów-Zdrój 2014
59. R.Socha, M.Ślęzak, M.Szczepanik-Ciba, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "CO oxidation on MnO/Pt(111) studied by XPS, TPD, XAS and PEEM", 30<sup>th</sup> European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014
60. A.Stępniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "Influence of Ammonia Co-adsorption on Spin and Electron Transfer for Co(II) Sites in Zeolites: IR Studies on NO Activation and DFT Modeling", 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014
61. M.Szaleniec, P.Dyshlovenko, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Description of protein adsorption in terms of colloidal interactions", COST Action CM1101 WG2 & WG5 Meeting Interactions in Colloidal Systems, Berlin 2014
62. M.Szaleniec, P.Dyshlovenko, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Can we Describe Protein Adsorption in Terms of Electrostatic Interactions?", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
63. M.Szaleniec, A.Rugor, J.Heider, T.Borowski, M.Witko "Monomolybdenum enzymes hydroxylating hydrocarbons – isotope experiments and modeling of mechanism", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014
64. M.Szaleniec, A.Rugor, E.Niedziałkowska, A.Dudzik, M.Tataruch, D.Knack "Biocatalytic Hydroxylation of Cholesterol and Its Derivatives", Conf. Life Science Open Space 2014, Kraków 2014
65. M.Szczepanik-Ciba, M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Pilet, J.Raabe, N.Spiridis, J.Korecki "LEEM/PEEM investigation of epitaxial metal and oxide manganese nanostructures on W(110)", European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014

66. K.Szczepanowicz, A.Karabas, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, P. Warszyński "Targeted drug delivery system based on polyelectrolyte nanocapsules", COST Action CM1101 WG3 & WG4 Meeting Synthesis of advanced nano- and bio-colloidal materials with highly active surfaces, Belgrade 2014
67. K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, M.Dziedzicka-Wasylewska, P.Warszyński "Encapsulated emulsion droplets as drug carriers", Conf. Smart and Green Interfaces, Marseille 2014
68. K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, K.Podgórna, M.Łapczyńska, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Multiwarstwy polielektrolitów w układach dostarczania leków", Semin. Projektu POIG FUNANO 2014, Krakow 2014
69. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, E.Bieleńska "Wpływ zawartosci Au w katalizatorach bimetalicznych PdAu/C otrzymanych metoda 'odwróconej mikroemulsji' na selektywność w reakcji uwodorniania aldehydu cynamonowego", 2. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Wrocław 2014
70. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, P.Warnicke, C.Quitmann, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", 12<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science ISSRNS-12, Warszawa 2014
71. M.Śliwa, R.Grabowski, A.Żelazny, A.Kornas, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.-F.Paul, D.Rutkowska-Żbik "Influence of polymorphic ZrO<sub>2</sub> phases and the copper electronic state on the activity of Cu/ZrO<sub>2</sub> catalysts in the hydrogenation of CO<sub>2</sub> to methanol", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
72. S.Świątek, B.Jachimska "Charakterystyka funkcjonalnych warstw wołowej β-laktoglobuliny (LGB)", I Semin. Naukowe Zielone Idee 21. Wieku, Poznań 2014
73. M.Tataruch, M.Szaleniec, A.Bogusławska, P.Nowak, J.Bryjak, J.Heider "Application studies on synthesis of chiral alcohols by ethylbenzene dehydrogenase", 7<sup>th</sup> Int. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014
74. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Bieleński "Generation of acidic sites in Al, Ga, In salts of molybdenum and tungsten heteropolyacids. DFT modeling and catalytic tests", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
75. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bieleński "Al, Ga, In salts of tungsten and molybdenum heteropolyacids - theory vs. experiment", 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014
76. T.Wilkosz, A.Weselucha-Birczyńska, J.Dutkiewicz, E.Bieleńska, J.Camra, L.Lityńska-Dobrzyńska, P.Kornelak, M.Najbar "Rola powinowactwa do tlenu i temperatur Tammanna metali w projektowaniu monolitycznych katalizatorów środowiskowych na folii ze stali kwasoodpornej, do redukcji tlenków azotu", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014

77. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of interactions of congo red with single-walled carbon nanotubes", Central European School on Physical Organic Chemistry, Przesieka 2014
78. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "How subtle differences in enzyme structures affect the reaction outcome? Theoretical studies on HMS and HPPD", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
79. M.Zajac, A.Bianco, C.J.Bocchetta, E.Busetto, P.Goryl, J.Korecki, M.Sikora, M.J.Stankiewicz, M.Ślęzak, A.I.Wawrzyniak, Ł.Żytniak "First bending magnet beamline at Solaris", 12<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science ISSRNS-12, Warszawa 2014
80. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyśa "Influence of surface-active substance on kinetics of the bubble attachment to hydrophobic solids", XIVth Polish- Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1st NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014
81. J.Zawała, D.Kosior, A.Niecikowska, K.Małyśa "Surface charge and kinetics of the three-phase contact formation at hydrophobic and hydrophilic solids", 15th Int. Conf. Surface Forces, Verbilki 2014
82. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Kornas, M.Lachowska "Influence of the carrier on physicochemical and catalytic properties of Cu-Ag/oxide catalysts for selective hydrogenolysis of glycerol to propylene glycol", 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014

## POSTERY

1. K.Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, J.Matusik, A.Michalik-Zym, E.Serwicka, E.Wisła-Walsh, W.Włodarczyk "Pillared montmorillonites as catalysts for removal of chlorinated volatile organic compounds from air-textural characterization," 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014
2. J.Barbasz, M.Cieśla "Random packing of disks on mesh", 27<sup>th</sup> M.Smoluchowski Symp. on Statistical Physics, Zakopane 2014
3. P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Cholesterol-phospholipid interactions in biological membranes at high cholesterol concentration", CCP5 Summer School 2014 Methods in Molecular Simulations, Manchester 2014
4. P.Batys, P.Weroński, M.Nosek "Multilayer films of colloidal particles - structure analysis", 4<sup>th</sup> Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2014
5. K.Bieda, B.Jachimska "Poly (amidoamine) (PAMAM) dendrimers: physicochemical characterization for multifunctional applications", FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014
6. K.Bieda, B.Jachimska "Structure of adsorbed 6<sup>th</sup> generation poly(amidoamine) PAMAM dendrimers on SiO<sub>2</sub> surface", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014

7. K.Bieda, B.Jachimska "Dendrimers – hyperbranched macromolecules as new tools in biomedical applications", Int. Conf. Challenges of Biotechnology in 21<sup>st</sup> Century, Kraków 2014
8. K.Bieda, B.Jachimska "Dendrimers: new nanocontainers for the application in medicine", Konf. Horyzonty Nauki 2014: Forum Prac Dyplomowych, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2014
9. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar "Supported Noble Metal Catalysts for Hydrodechlorination of Organic Compounds: from the Choice of Preparation Method to Catalytic Properties", Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, Falenty 2014
10. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrodechlorination of CCl<sub>4</sub> over carbon-supported palladium-gold catalysts prepared by reverse 'water-in-oil' microemulsion method", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
11. K.Chruszcz-Lipska, T.Borowski, M.Barańska "Enantiomer-specific detection of chiral sodium pravastatin by raman spectroscopy: experimental and theoretical studies", Conf. SPEC 2014 Shedding New Light on Disease, Kraków 2014
12. A.Czapla, A.Micek-Ilnicka "Synteza diizopropylowego eteru DIPE katalizowana przez heteropolikwas H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
13. M.Ćwięka, B.Jachimska "Characterization of proteins structures using the QCM method", Konf. Horyzonty Nauki 2014: Forum Prac Dyplomowych, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2014
14. M.Ćwięka, B.Jachimska, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran "Adsorption of Lysozyme on SiO<sub>2</sub> surface (experiments and simulations)", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
15. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Lysozyme Adsorption at SiO<sub>2</sub> and Mica Surfaces: Atomistic Molecular Dynamics and Experiments", FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014
16. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Lysozyme Adsorption on SiO<sub>2</sub> Surface: Studied by MP-Surface Plasmon Resonance and Quartz Crystal Microbalance", MP-SPR Scientific Meeting Europe, Amsterdam 2014
17. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Understanding Lysozyme Adsorption Phenomena", Int. Conf. Challenges of Biotechnology in 21<sup>st</sup> Century, Kraków 2014
18. K.Drabczyk, R.P.Socha, A.Skwarek "Copper deposition on screen printed electrical paths for solar cell application - the surface studies", 38<sup>th</sup> Int. Conf. of IMAPS-CPMT, Rzeszów 2014
19. A.Drelinkiewicz, Z.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Zieba, J.Stejskal "Bio-esters formation in transesterification and esterification reactions on polyaniline doped with various sulfonic acids", 3<sup>rd</sup> Biotechnology World Congr., Dubai 2014

20. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Oszajca, A.Franke, D.Rutkowska-Zbik, M.Brindell, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik "Theoretical studies on reactivity of model complexes for Cpd I and Cpd II", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
21. A.Dudzik, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, M.Szaleniec, M.Witko "Prediction of reactor progress-curves of enzymatic reduction of para-substituted acetophenones with artificial neural networks", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
22. A.Dudzik, M.Szaleniec, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko, J.Heider "(S)-1-Phenylethanol dehydrogenase as a catalyst in prochiral compounds reduction", 7<sup>th</sup> Int. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014
23. A.Dudzik, M.Szaleniec, W.Snoch, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko, J. Heider "(S)-1-Phenylethanol dehydrogenase as a catalyst in prochiral compounds reduction", 2<sup>nd</sup> Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, Warszawa 2014
24. A.Dudzik, M.Szaleniec, M.Witko "Theoretical studies of enzyme-substrate interactions in phenylethanol dehydrogenase", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
25. R.Dula, B.Napruszewska, J.Kryściak-Czerwenka, W.Rojek, T.Machej, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Określenie wpływu zawartości Mn w prekursorach typu charmarytu na właściwości prekursorów i produktów ich kalcynacji", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
26. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, E.Bielańska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, A.Drelinkiewicz, J.Kryściak-Czerwenka, A.Bukowska, W.Bukowski "Badanie wpływu rozpuszczalnika na aktywność katalityczną katalizatorów rutenowych w reakcji uwodornienia acetolu", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
27. K.Durczyk, J.Rakoczy, B.Sulikowski "Shape-selectivity in alkylation and isomerization reactions over FAU MFI and MOR type zeolites", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
28. K.Durczyk, B.Sulikowski "Ultrastabilne formy zeolitu typu Y w świetle badań <sup>29</sup>Si i <sup>27</sup>Al MAS NMR", 45. Ogólnopolskie Semin., nt. Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2014
29. K.Durczyk, B.Sulikowski "Wpływ modyfikacji termochemicznych zeolitu typu Y na jego właściwości fizykochemiczne", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
30. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Chemical oxidation supported photodecomposition of industrial dyes", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
31. J.Dziedzic, G.Potasiewicz, K.Szczepanowicz, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Formation of capillary-bridges with embedded nanoparticles for thermal joints", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
32. A.Dziedzicka, Ł.Kuterasiński, B.Sulikowski "Structural changes in natural clinoptilolite upon dealumination and desilication", 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014

33. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Właściwości fizykochemiczne modyfikowanych klinoptylolitów ze złóż naturalnych", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
34. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Dealuminiowanie zeolitów naturalnych w świetle badań metodą spektroskopii NMR w ciele stałym", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
35. S.Dźwigaj, P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, T.Shishido "The influence of the preparation procedure on the catalytic activity of Fe-BEA zeolites in SCR of NO with ammonia and N<sub>2</sub>O decomposition", 7<sup>th</sup> Tokyo Conf. on Advanced Catalytic Science and Technology TOCAT7, Kyoto 2014
36. M.Elżbieciak-Wodka, F.J.Montes Ruiz-Cabello, P.Maroni, M.Borkovec "Direct force measurements between negatively charged particles in presence of monovalent and multivalent ions", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
37. U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Czapla, A.Bielański "Ethoxonium ion as intermediate species in ethanol dehydration on mono- and bi-cationic salts of H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
38. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Deposition of zeolite nanoparticles onto highly porous silica monolith", 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014
39. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Nanoszenie nanocząstek zeolitu ZSM-5 na funkcjonalizowaną powierzchnię porów monolitu krzemionkowego", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
40. G.Gochev, J.Won, V.Ulaganatha, I.Retzlaff, J.Krägel, M.Krzan, K.Malysa, V.B.Fainerman, E.V.Aksenenko, D.Exerowa, R.Miller "Dynamic surface properties and foam film behaviour of  $\beta$ -lactoglobulin (BLG) solutions", 10<sup>th</sup> European Conf. on Foams and Applications - Eurofoam 2014, Thessaloniki 2014
41. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Strength of acid sites on amorphous silica from DFT calculations", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014
42. R.Gryboś, R.Tokarz-Sobieraj, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański, M.Witko "Aktywność katalityczna soli Al, Ga, In, heteropolikwasów wolframowych i molibdenowych w eksperymencie i w teorii", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
43. R.Gryboś, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda "Opis oddziaływania klastrów mono i bi-metalicznych z nośnikami i zaadsorbowaną wodą", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
44. M.Grzesiak-Nowak, G.Appleby, W.Łasocha "Badania nowych związków halogenków kadmu z fluoroanilina", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014

45. M.Grzesiak-Nowak, J.Dranka, A.Rafalska-Łasocha, A.Pawlak, W.Łasocha "Investigation of pigments and ground layers by  $\mu$ -XRPD", 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014
46. M.Grzesiak-Nowak, A.Szymańska, W.Łasocha "Badania grupy związków kadmu z liniowymi diaminami", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
47. J.Handzlik, K.Kurleto, H.Guesmi, F.Tielens, R.Gryboś "Structure of isolated Cr(VI), Mo(VI) and W(VI) oxide species on silica – a comparative periodic DFT study", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014
48. D.Jantas, M.Piotrowski, W.Lasoń "Neuroprotective effects of undecylenic acid (UDA) against hydrogen peroxide-, staurosporine- and doxorubicin-induced cell damage in human neuroblastoma SH-SY5Y cells", 12<sup>th</sup> Int. Symp. Molecular Basis of Pathology and Therapy in Neurological Disorders, Warszawa 2014
49. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Transestryfikacja glicerydów i estryfikacja kwasów tłuszczowych w obecności katalizatorów polimerowych zawierających kwasy sulfonowe", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
50. Ż.Kalemba-Jaje, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Katalizatory polimerowe do produkcji estrów metylowych", Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014
51. A.Karabasz, M.Bzowska, R.Mężyk-Kopeć, J.Bereta, K.Szczepanowicz "Polielektrolitowe nanokapsułki jako nośniki leków przeciwnowotworowych", Międzyuczelniane Symp. Biotechnologiczne, Warszawa 2014
52. R.Karcz, P.Klein, V.Pashkova, S.Sklenak, J.Dedecek, "Al distribution in TNU-9 zeolite", 46<sup>th</sup> Symp. on Catalysis, Prague 2014
53. R.Karcz, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Aktywność katalityczna heteropolizwiązków dotowanych jonami żelaza lub kobaltu w reakcji utleniania cyklooktanu nadtlenkiem wodoru", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
54. A.Klimek, J.Dziadkowiec, M.Rogowska, A.Gaweł, K.Bahranowski, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Kompozyty na osnowie delaminowanych minerałów warstwowych", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
55. D.H.Knack, E.Niedziałkowska, N.Zawada, M.Szaleniec "Heterologous expression of steroid C25 dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans*", 7<sup>th</sup> Int. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014
56. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of proton transverse relaxation times in suspension of magnetic nanoparticles", Central European School on Physical Organic Chemistry, Przesieka 2014
57. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, W.Rojek "Physicochemical characteristics of CuO/ZrO<sub>2</sub> in reaction for obtaining dimethyl ether from CO<sub>2</sub>", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014



58. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, W.Rojek "Physicochemical characteristics of metallic function of catalysts in reaction of hydrogenation of CO<sub>2</sub> in the way dimethyl ether", 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014
59. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, R.Tokarz-Sobieraj, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, W.Rojek "Właściwości fizykochemiczne składowej metalicznej katalizatorów do uwodornienia CO<sub>2</sub> w kierunku eteru dwumetylowego", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
60. D.Kosior, J.Zawała, R.Todorov, D.Exerowa, P.Warszyński, K.Małyś "Foam Films and Bubble Bouncing at Free Surface of n-octanol solutions", 15th Int. Conf. Surface Forces, Verbilki 2014
61. R.Kosydar, T.Szumelda, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz, E.Bielańska "Nośnikowe katalizatory bimetaliczne PdAu, PdPt syntezowane metodą 'odwróconej mikroemulsji' w reakcjach uwodorniania", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
62. R.Kosydar, T.Szumelda, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz, E.Bielańska "Supported bimetallic PdAu, PdPt catalysts synthesised by the reverse microemulsion method in hydrogenation reactions", Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014
63. P.Kozyra, J.Datka, E.Broclawik "Activating charge transfer flows for hydrogen interacting with Ag<sup>+</sup>, Cu<sup>+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup> zeolite cationic sites: ETS-NOCV analysis", 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014
64. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "Nanostructured multilayer polyelectrolyte films formed with reduced graphene oxide for advanced materials and sensors", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
65. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "Functional multilayer films formed with reduced graphene oxide for advanced materials", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
66. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "Influence of different electrolytes on bubble motion in ionic surfactants solutions", 10<sup>th</sup> European Conf. on Foams and Applications - Eurofoam 2014, Thessaloniki 2014
67. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, E.Rogalska "Fast method for detection of water soluble surface-active products of enzymatic reaction", 10<sup>th</sup> European Conf. on Foams and Applications - Eurofoam 2014, Thessaloniki 2014
68. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, V.Ulaganathan, M.Lotfi, A.Javadi, R.Miller "The stable and biodegradable aqueous foams for industrial and biomedical applications", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
69. M.Krzan, K.Małyś "Influence of n-alcohols chain length (C<sub>2</sub>-C<sub>10</sub>) on initial acceleration, local and terminal velocities of the rising bubbles", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014

70. K.Kubiak, A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "QCM and streaming potential studies of PDADMAC monolayers", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
71. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Morga, E.Kowalska "Comparative physicochemical studies of human albumin monomer and the synthetic cross-linked dimer", FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014
72. M.Kujda, Z.Adamczyk, K.Sofińska "Globular protein monolayers on polystyrene microspheres", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
73. Ł.Kuterasiński, M.Derewiński "Rozróżnienie centrów kwasowych słabej mocy w zeolitach MFI izomorficznie podstawionych borem", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
74. Ł.Kuterasiński, M.Motak "The influence of the presence of NO on the catalytic activity in the reaction of VOC oxidation on layered aluminosilicates", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
75. Ł.Kuterasiński, M.Motak, P.da Costa "The investigation of modified aluminosilicates as bi-functional catalysts for VOX oxidation and DeNO<sub>x</sub> process", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
76. P.Kwolek, K.Szaciłowski, M.Łapczyńska "Photoelectrochemistry of lead molybdate", Chemistry Conf. for Young Scientists ChemCYS 2014, Blankenberge 2014
77. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Microcalorimetric study of the process of recombination of H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> under conditions similar to those of the real-life PAR reactors", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
78. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Microcalorimetric study of the process of recombination of H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> under conditions similar to those of the real-life PAR reactors", Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014
79. E.Lalik, R.Kosydar, W.Rojek, J.Gurgul, T.Szumelda, M.Kołodziej, A.Drelinkiewicz "A role of alkali (Li, Cs) dopant on Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: humidity interactions during hydrogen and oxygen recombination reaction", Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, Falenty 2014
80. E.Lalik, L.Matachowski, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Microcalorimetric study of anomalous heat evolution in the system of metallic nanoparticles and hydrogen", Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, Falenty 2014
81. E.Lalik, M.Oćwieja, L.Matachowski, M.Pavlovic, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Microcalorimetric study of anomalous heat evolution in the system of metallic nanoparticles and hydrogen", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
82. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Hybrid organic-inorganic materials of the type MeX<sub>n</sub>(MXDA)<sub>m</sub>, Me=Ni, Co, Mn, Cd and X=I, Cl, Br", E-MRS, 2014 Fall Meeting Warszawa 2014

83. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Struktura związków typu  $\text{MeSO}_4(\text{MXDA})$  (Me = Ni, Co, Mn) i ich charakterystyka", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014
84. K.Luberda-Durnaś, L.Matachowski, D.Mucha, M.Oszajca, W.Łasocha "Characterization of a New Type Carrier  $\text{PW}_{12}\text{O}_{38.5}$  Obtained by the Annealing of  $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$  at  $700^\circ\text{C}$ ", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014
85. K.Luberda-Durnaś, M.Mosiąlek, A.Kędra, E.Bielańska "Transport chemiczny materiałów wchodzących w skład SOFC katalizowany obecnością związków chloru", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
86. K.Luberda-Durnaś, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe typu  $\text{CdX}_2(\text{MXDA})$  (X- Br, Cl)", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
87. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, E.Bielańska, P.Warszyński "Phase inversion emulsification as a method of synthesis of nanoparticles containing neuroprotective substances for drug delivery systems", XIV<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1<sup>st</sup> NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014
88. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of nanoparticles containing active neuroprotective substances from nanoemulsions by phase inversion emulsification method", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
89. W.Łasocha, A.Szymańska, M.Oszajca, W.Nitek, K.Pamin, J.Połtowicz "Struktura, badania fizykochemiczne i katalityczne molibdenianów 4-propyloaniliny", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
90. S.Łukasiewicz, K.Szczepanowicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska "Interaction of polyelectrolyte nanocapsuls with macrophages". Conf. Nanomedicine 2014, Edinburgh 2014
91. D.Majda, M.Zimowska, K.Mlekodaj, M.Mańko, K.Tarach, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, W.Makowski, E.Serwicka "Charakterystyka materiałów mezoporowatych metodą termoporozymetrii", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
92. B.Matlak, A.Koziół-Rachwał, K.Matlak, J.Przewoźnik, T.Ślęzak, J. Korecki "Horizontal shift of the hysteresis loop for ultrathin Fe film on  $\text{MgO}(001)$  substrate", European Conf. Physics of Magnetism PM'14, Poznań 2014
93. M.Matczak, F.Lisiecki, P.Kuswik, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, T.Giela, J.Raabe, N.Pilet, P.Mazalski, J.Korecki, A.Maziewski, J.Dubowik, F.Stobiecki "Magnetic structure of artificial spin ice", European Conf. Physics of Magnetism PM'14, Poznań 2014
94. A.Michalik-Zym, W.Rojek, T.Machej, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Katalizatory palladowe na nośnikach montmorillonitowych do katalitycznej rekombinacji wodoru i tlenu", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014

95. A.Michalik-Zym, W.Rojek, T.Machej, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka, R.Tokarz-Sobieraj "Katalizatory palladowe na nośnikach montmorillonitowych do katalitycznej rekombinacji wodoru i tlenu", Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014
96. A.Michna, Z.Adamczyk "Tworzenie i stabilność monowarstw poli(chloroku dimetylodialiloamoniowego) na mice wyznaczone *in situ* przy użyciu metody potencjału przepływu", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
97. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetics of fluorescent latex particle deposition at polyelectrolyte monolayers determined by in situ measurements in flow cell", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
98. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Morga "Kinetyka osadzania nanocząstek srebra oraz mikrosfer polistyrenowych na monowarstwach polielektrolitów", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
99. A.Michna, M.Cieśla, Z.Adamczyk "The replacement of adsorbed PDAMAC molecules by positively charged latex particles -pseudo-Vroman effect", 27<sup>th</sup> M.Smoluchowski Symp. on Statistical Physics, Zakopane 2014
100. A.Michna, M.Cieśla, J.Barbasz "Parallel adsorption of two types of colloidal microspheres and proteins on flat substrate- theoretical and experimental studies", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
101. A.Michna, M.Morga Z.Adamczyk "Deposition kinetics of silver nanoparticle and polystyrene microspheres of polyelectrolyte covered surfaces", Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014
102. A.Miłaczewska, T.Borowski "Insight into a reaction mechanism of acireductone-dioxygenation – DFT studies for a model system", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
103. L.Mokrzycki, P.Klein, V.Pashkova, Š.Sklenak, V.I.Parvulescu, N.Candu, G.Sadovska, J.Dědeček, P.Šťastný, P.Sazama, "Synthesis of Al-rich BEA zeolite and its potential for acid and redox catalysis", 46<sup>th</sup> Symp. on Catalysis, Prague 2014
104. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, E.Bielańska "Wytwarzanie biwarstw nanocząstek  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ag dla potencjalnych zastosowań w katalizie", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
105. M.Mosiąlek, M.Dudek, G.Mordarski "AC impedance study of oxygen reduction at the silver point electrode contacted doped ceria electrolyte", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
106. M.Mosiąlek, M.Dudek, G.Mordarski "Al<sub>0.04</sub>Sc<sub>0.06</sub>ZrO<sub>1.95</sub> as an electrolyte for solid oxide fuel cells. The silver electrode behavior upon the long time polarization, SEM and EIS study", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014

107. M.Mosiąlek, A.Kędra, R.P.Socha, P.Nowak, G.Mordarski "Chemical transport by volatile chromium compounds as a reason for the corrosion in the high temperature solid oxide fuel cells", Conf. Corrosion 2014, Gliwice 2014
108. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk "Nanoparticle Monolayers on Polystyrene Latex Carrier Particles", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
109. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska "Fibrinogen Adsorption Mechanisms Revealed by Streaming Potential, AFM and Colloid Deposition Measurements", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014
110. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Morga, M.Oćwieja "Hematite Nanoparticle Monolayers: Characterization by Colloid Deposition", Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014
111. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Redox properties of modified Keggin heteropolyacids", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014
112. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Electronic structure of Cu containing Dawson heteropolyacids. DFT cluster calculations", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014
113. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Redox properties of Cu ions introduced in various structure of heteropolyacids. DFT cluster model studies", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
114. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Interaction of carbon dioxide with heteropolyacids modified by transition metal atoms. DFT cluster model studies", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
115. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Właściwości utleniająco-redukujące modyfikowanych heteropolikwasów. Obliczenia klasterowe DFT", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
116. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Struktura elektronowa heteropolikwasów o strukturze anionu Dawsona. Obliczenia klasterowe DFT", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
117. M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Novel method for study of thin porous layers", 4<sup>th</sup> Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2014
118. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Osadzanie nanocząstek srebra na powierzchniach stałych – wpływ siły jonowej, pH oraz temperatury na stabilność otrzymanych monowarstw", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
119. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Adsorption of tannic acid on polyelectrolyte monolayers determined in situ streaming potential measurements", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014

120. M.Oćwieja, A.Gorczyca, M.Niemiec, Z.Adamczyk, E.Pociecha "Effect of charge-stabilized silver nanoparticles with various surface properties on physiological state of seedlings of *Triticum aestivum*", FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014
121. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Materiały warstwowe na bazie czastek protozeolitycznych typu MFI jako katalizatory w niskotemperaturowej reakcji izomeryzacji terpenów", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
122. J.Olszówka, R.Karcz, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Catalytic oxidation of cyclohexanone to  $\epsilon$ -caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite catalysts", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
123. M.Oszajca, P.Dulian, M.Kozieł, W.Łasocha "Badania strukturalne związków kompleksowych typu  $ZnX_2(\text{amina})_2$ ", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014
124. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Zimowska, D.Mucha, M.Ruggiero-Mikołajczyk "The composites containing N-doped carbon nanotubes grown on cobalt nanoparticles derived from cobalt-containing layered double hydroxides as electrocatalysts for oxygen reduction reaction", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
125. A.Pajor-Świerzy, T.Kruk, L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, R.Wendelbo, P.Warszyński "The electrocatalytic properties of the multilayer polyelectrolyte films formed with Prussian Blue nanoparticles and reduced graphene oxide", Graphene Week 2014, Goteborg 2014
126. H.Pálková, L.Jankovič, M.Zimowska, E.M.Serwicka, J.Madejová "Physico-chemical properties of the acid activated organo-modified clays", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
127. H.Pálková, L.Jankovič, M.Zimowska, B.Sulikowski, E.M.Serwicka, J.Madejová "Characterization of the acid treated clays modified with quaternary phosphonium and ammonium cations", 5<sup>th</sup> Int. Workshop on Layered Materials, Mulhouse 2014
128. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, W.Kubiak "Badanie właściwości katalitycznych i elektrochemicznych soli kobaltowych kwasu wolframowego i molibdenowego w reakcji utleniania fenolu", 13. Konf. Elektroanaliza w Teorii i Praktyce, Kraków 2014
129. K.Pamin, A.Ładocha, S.Basąg, W.Kubiak, J.Połtowicz "Elektrochemiczne badanie właściwości kationowych metaloporfiryn", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
130. K.Pamin, J.Maciejewska, J.Połtowicz, S.Basąg, W.Kubiak "Synteza oraz badania fizykochemiczne serii soli żelazowych heteropolikwasów  $H_3PMO_{12}O_{40}$  i  $H_3PMO_{12}O_{40}$ ", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
131. K.Pamin, J.Połtowicz, N.Wolan, A.Adamski "Synthesis and physicochemical properties of new salen ligand and salen metallocomplexes", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014

132. K.Pamin, M.Prończuk, J.Połtowicz, E.M.Serwicka-Bahranowska "Polyoxometalates as catalysts for oxidation of cycloketone to cyclolactone with molecular oxygen", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
133. G.Para, E.Jarek, K.Szczepanowicz, J.Łuczyński, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of Esterquat Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/Water Interface", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
134. P.Piechota, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, W.P.Węglarz "Evaluation of the relaxation and the imaging properties of SPIO loaded nanocapsules at 9.4 T", 45. Ogólnopolskie Semin., nt. Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2014
135. M.Piotrowski, M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Leśkiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules as a delivery system for neuroprotectants", Conf. Innovations in Encapsulation 2014, London 2014
136. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Evaluation of neuroprotective action of nanocapsules containing undecylenic acid", Conf. Nanomedicine 2014, Edinburgh 2014
137. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, S.Łukasiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Nanoparticulate delivery systems for neuroprotective drugs", Summer School of Nanomedicine and Innovation 2014, Tel Aviv 2014
138. W.Płaziński, M.Drach "Exploring the hexopyranose ring conformations", Conf. Bioinformatics in Toruń BIT14, Toruń 2014
139. W.Płaziński, M.Drach "Computer simulations of calcium binding by alginates: insight into the molecular details of the process dynamics", 27<sup>th</sup> Int. Carbohydrate Symp., Bangalore 2014
140. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates: QM/MD Study", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014
141. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates: QM/MD Study", XIVth Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1st NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014
142. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, M.Szaleniec, M.Zimowska, P.Warszyński "Preparation of polymer hydrogels as carriers of active agent", XIV<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1<sup>st</sup> NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014
143. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, M.Szaleniec "Immobilization of (S)-1-Phenylethanol dehydrogenase (PEDH) in alginate gel", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014

144. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, M.Szaleniec, J.Opalińska-Piskorz "Preparation of polymer hydrogels as carriers of active agent and microorganisms", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
145. K.Podgórna, A.Dudzik, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, M.Szaleniec, J.Opalińska-Piskorz "Preparation of calcium alginate hydrogels as carriers of E.colli cells", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
146. K.Podgórna, M.Łapczynska, T.Kruk, M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Targeted drug delivery systems based on polyelectrolyte nanocapsules", Conf. BiPoCo 2014, Visegrad 2014
147. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A. Dudzik, M. Szaleniec "Encapsulation of active agents and microorganisms in polymer hydrogels", Conf. BiPoCo 2014, Visegrad 2014
148. A.Popov, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, A.Ramanaviciene, A.Ramanavicius "Physicochemical characteristics of charge-stabilized silver sols", 19<sup>th</sup> Int. Conf. EcoBalt 2014, Riga 2014
149. M.Radoń, E.Broclawik "Metal-nitrosyl bonding in transition metal complexes: role of resonance structures and spin states", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014
150. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, M.Kozieł, B.Szmelter-Fausek, J.Olszewska-Świetlik, W.Łasocha "Zastosowanie technik mikro-dyfrakcyjnych ( $\mu$ -XRPD) do identyfikacji materiałów malarskich", 14. Konf. Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2014
151. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, J.Olszewska-Świetlik, B.Szmelter-Fausek, W.Łasocha " $\mu$ -XRPD investigations of the pigments in 17th century panel paintings from Gdansk and the northern region of Poland", Conf. Synchrotron Radiation and Neutrons in Art and Archaeology, Paris 2014
152. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, D.Sarkowicz, W.Łasocha "Investigation of historic pigments and painting materials in works by Henryk Siemiradzki, Conf. Synchrotron Radiation and Neutrons in Art and Archaeology, Paris 2014
153. A.Rafalska-Łasocha, K.Luberda-Durnaś, E.Modzelewska, A.Pawlak, W.Łasocha "XRPD Investigations of ground layers in paintings from the collection of Wilanów Palace Museum", 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014
154. A.Rafalska-Łasocha, K.Luberda-Durnaś, E.Modzelewska, A.Pawlak, W.Łasocha "Badania dyfrakcyjne warstw gruntów w obrazach z kolekcji Muzeum Pałacu w Wilanowie", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014
155. A.Rafalska-Łasocha, J.Szydłowska, M.Grzesiak-Nowak, D.Sarkowicz, W.Łasocha "Investigation of historic powdery pigments inherited from Henryk Siemiradzki", 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and Other Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage, Kraków 2014



156. A.Rafalska-Łasocha, J.Szydłowska, M.Grzesiak-Nowak, D.Sarkowicz, W.Łasocha "Badania historycznych pigmentów Henryka Siemiradzkiego", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014
157. A.Rugor, A.Dudzik, M.Tataruch, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Application Potential of steroid C25 Dehydrogenase from Sterolibacterium Denitrificans", 7<sup>th</sup> Int. Congr. on Biocatalysis BIOCAT 2014, Hamburg 2014
158. M.Ruggiero, R.Grabowski, G.Mordarski, K.Samson, A.Żelazny, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik "Electrochemical oxidation of methane and reduction of oxygen on the electrodes in the single-chamber solid oxide fuel cell (SC SOFC)", 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Environmental Catalysis, Asheville 2014
159. M.Ruggiero, A.Żelazny, M.Śliwa, R.Grabowski, K.Samson, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Influence of the metallic and acidic component modification on the activity of bifunctional catalysts for one-step DME synthesis from syngas", 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Environmental Catalysis, Asheville 2014
160. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, K.Samson, D.Rutkowska-Żbik, T.Machej, R.Grabowski "Metan jako paliwo do jednokomorowego wysokotemperaturowego ogniwa paliwowego (SC SOFC) w układach Pt/YSZ/Au oraz cermet Ni /YSZ/Au", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
161. D.Rutkowska-Żbik, M.Buchalska, W.Macyk "Właściwości spektroskopowe wybranych kompleksów Ti(IV) jako sensybilizatorów w układach fotokatalitycznych i ogniwach fotowoltaicznych typu DSSC", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
162. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, R.Tokarz-Sobieraj, J.Korecki "Jak nauczać nanotechnologii?", 57. Zjazd Naukowy PTChem i SITPCh, Częstochowa 2014
163. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, Ł.Orzeł, M.Świrski, A.Kania, G.Stochel "Czynniki warunkujące transmetalację metaloporfiryn", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
164. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Colloid Carrier Particles, 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014
165. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of Nanoparticle Deposition on Colloid Particles", Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014
166. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanisms of Nanoparticle Monolayer Formation on Colloid Carrier Particles", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
167. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M. Wasilewska "Conformations of Fibrinogen Monolayers Determined by the Colloid Deposition Method", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014

168. K.Samson, A.Żelazny, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, M.Lachowska, M.Śliwa, Ł.Mokrzycki, A.Kornas "Wpływ nośnika na właściwości fizykochemiczne i katalityczne katalizatorów Cu-Ag/nośnik tlenkowy do reakcji selektywnej hydrogenolizy glicerolu", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
169. E.M.Serwicka, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.Bielańska, A.Klimek, A.Gaweł, K.Bahranowski "Hydrotalcite/montmorillonite nanocomposite", 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014
170. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński "Understanding cholesterol effect on biological membranes: cholesterol-phospholipid interactions at high cholesterol concentration", 4<sup>th</sup> Summer Symp. on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, Poznań 2014
171. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, M.Lipiński, P.Warszyński "Metallic and bimetallic catalysts for silicon etching", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
172. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, M.Lipiński, P.Warszyński "Metallic and bimetallic catalysts for silicon etching", Conf. Organic photovoltaics-from molecules to solarcells, Białystok 2014
173. R.P.Socha, M.Ślęzak, M.Szczepanik-Ciba, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, J.Korecki, "CO oxidation on MnO/Pt(111) studied by XPS, TPD, XAS and PEEM", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
174. K.Sofińska, Z.Adamczyk, M.Kujda "Monolayers of human albumins on colloidal carrier particles and flat surfaces: thorough physicochemical characteristics in terms of electrokinetic methods", FEBS-EMBO Conf. 2014, Paris 2014
175. N.Spiridis, K.Freindl, E.Madej, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "Phase composition and transformations in ultrathin iron oxide films on Pt(111)", 30<sup>th</sup> European Conf. on Surface Science ECOSS 30, Antalya 2014
176. Z.Starowicz, K.Berent, R.P.Socha, J.Dziedzic, M.Lipiński "Photochemical deposition of the plasmonic silver structures", E-MRS 2014 Spring Meeting Lille 2014
177. Z.Starowicz, G.Kulesza, M.Lipiński, A.Kędra, R.P.Socha "Light scattering silver nanoparticles based plasmonic structure for silicon PV - properties and deposition process", 3<sup>rd</sup> Int. PhD Seminar, Dresden 2014
178. A.Stępniewski, E.Broclawik, K.Góra-Marek, M.Radoń "Modification of cobalt sites in zeolites by coadsorption of electron donor/acceptor ligands and its impact on the strength of NO bond", 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014
179. A.Stępniewski, E.Broclawik, K.Góra-Marek, M.Radoń "Electron transfer processes crucial for coadsorption of NO and small ligands on cobalt sites in zeolites", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014

180. A.Śtepniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "Influence of Ammonia Co-adsorption on Spin and Electron Transfer for Co(II) Sites in Zeolites: IR Studies on NO Activation and DFT Modeling", 6<sup>th</sup> FEZA Conf. Leipzig 2014
181. A.Śtepniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "Modification of Cobalt Sites in Zeolites by Coadsorption of Electron Donor/Acceptor Ligands and its Impact on the Strength of NO Bond", Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, Falenty 2014
182. A.Śtepniewski, K.Góra-Marek, M.Radoń, E.Broclawik "The influence of ammonia molecules on electron transfer processes imposed by the interaction between NO and cobalt sites in zeolites: SR-NOCV analysis of the Co-NO bond", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
183. B.Szaraniec, M.Oćwieja, M.Kujda, B.Piec "Silver nanoparticles modified titanium for medical applications", 26<sup>th</sup> Annual Conf. of the European Society for Biomaterials ESB, Liverpool 2014
184. K.Szczepanowicz A.Karabas, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Cytotoxic activity of paclitaxel incorporated into polyelectrolyte nanocapsules", Conf. Nanomedicine 2014, Edinburgh 2014
185. K.Szczepanowicz, A.Karabas, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as an Anticancer Drug Carriers", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
186. K.Szczepanowicz A.Karabas, M.Bzowska, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules for targeted delivery of anticancer drugs", Conf. Innovations in Encapsulation 2014, London 2014
187. K.Szczepanowicz, P.Piechota, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules containing iron oxides as imaginable magnetically responsive drug delivery system", Conf. Nanocon 2014, Brno 2014
188. K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Magnetically Responsive Polyelectrolyte Nanocapsules", 28<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Soc. ECIS2014, Limassol 2014
189. A.Szymańska, E.Grudzińska, W.Łasocha " badania strukturalne oxidiperoxo kompleksów molibdenianowych i molibdenianowo-wolframianowych", 56. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2014
190. A.Szymańska, W.Łasocha, K.Pamin, J.Połtowicz "Molybdenum catalysts for cycloalkanes oxidation with molecular oxygen", 21<sup>st</sup> Int. Congr. of Chemical and Process Engineering CHISA 2014, Prague 2014
191. A.Szymańska, W.Nitek, M.Oszajca, W.Łasocha, K.Pamin, J.Połtowicz, R.Karcz "Influence of polymolbdates structure on their activity in oxidation of cycloalkanes with molecular oxygen", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014

192. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, R.Socha, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, P.Warnicke, C.Quitmann, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", LEEM/PEEM 9<sup>th</sup> Workshop, Berlin 2014
193. M.Śliwa, A.Żelazny, A.Kornas, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski "Investigation of hybrid catalysts deactivation in syngas to dimethyl ether process", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
194. S.Świątek, M.Ćwięka, K.Bieda, B.Jachimska "Hybrydowe warstwy polielektrolitowe do aplikacji biomedycznych", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
195. M.Tataruch, M.Szaleniec, P.Nowak, A.Czerniak, J.Bryjak, J.Heider "Application studies on synthesis of chiral alcohols by ethylbenzene dehydrogenase", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
196. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, A.Kędra, P.Nowak, E.Bieleńska "New Cathode Materials Composed of Ag,  $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ , and  $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{FeO}_3$  for Solid Oxide Fuel Cells", 11<sup>th</sup> Int. Symp. Systems with Fast Ionic Transport, Gdańsk 2014
197. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, G.Mordarski, E.Bieleńska, J.Wojewoda-Budka "Catalytic reduction of oxygen on composite material  $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3\text{-Ag}$ ", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
198. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, A.Kędra "New composite material  $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3\text{-La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{FeO}_3$  for solid oxide fuel cells", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
199. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Application of MP-SPR and QCM-D techniques in the quantitative interpretation of PAMAM dendrimers adsorption", MP-SPR Scientific Meeting Europe, Amsterdam 2014
200. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bieleński, M.Witko "Sole glinowe, galowe i indowe heteropolikwasów. Obliczenia DFT vs. badania katalityczne", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
201. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Teoretyczny opis heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi", Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014
202. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, A.Bieleński "Al, Ga, In salts of heteropolyacids. DFT modeling vs. catalytic test", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014
203. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "DFT Cluster Calculations of modified Cu-HPA", 15th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC15, London 2014
204. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "DFT modeling of tungsten heteropolyacids modified by Cu ion(s)", 12<sup>th</sup> Panonian Symp. on Catalysis, Trest 2014

205. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Keggin anion modified by cations from first row transition metal", 12<sup>th</sup> Panonnian Symp. on Catalysis, Trest 2014
206. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, P.Niemiec "Type of coordination of Cu<sup>2+</sup> and Cu<sup>1+</sup> ions in different solvents. DFT modeling", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
207. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, P.Niemiec "Sposób koordynacji jonów miedziowych w różnych rozpuszczalnikach", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
208. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda, R.Kosydar "Interaction of mono- and bi- metallic nanoclusters with the water molecule. DFT cluster model studies vs. experiment", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
209. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumeda "Oddziaływanie małych klasterów metalicznych z woda i nośnikami. Obliczenia teoretyczne DFT vs eksperyment", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
210. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda "Opis oddziaływania monocentrowych i bimetalicznych klasterów Pd, Pt, Au z wodą i wybranymi nośnikami. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment", Konf. Postępy w Katalizie Heterogenicznej, Międzyzdroje 2014
211. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz, W.Rojek, T.Szumelda, R.Kosydar "Wpływ czynników elektronowych i geometrycznych na adsorpcję wody na klasterach mono- i bi-metalicznych", Konf. Struktura a Reaktywność Układów Metal/Nośnik, Falenty 2014
212. A.Węgrzynowicz, M.Oćwieja, P.Michorczyk, Z.Adamczyk "Chromium - free catalyst based on hematite nanopowder for hydrogen production in water-gas shift (WGS) reaction", Int. Symp. on Clean Energy from Ethanol ISCEE 2014, Rzeszów 2014
213. A.Węgrzynowicz, M.Oćwieja, P.Michorczyk, Z.Adamczyk "Synthesis and characterization of well-defined catalyst for the WGS reaction based in the hematite nanoparticles", BaltSilica 2014 Conf., Poznań 2014
214. D.Wilgocka-Ślęzak, M.Szczepanik-Ciba, M.Ślęzak, T.Giela, N.Pilet, J.Raabe, N.Spiridis, J.Korecki "LEEM/PEEM investigation of epitaxial metal and oxide manganese nanostructures on W(110)", LEEM/PEEM 9<sup>th</sup> Workshop, Berlin 2014
215. T.Wilkosz, A.Weselucha-Birczyńska, J.Dutkiewicz, E.Bieleńska, M.Najbar "Badanie aktywności monolitycznych katalizatorów na stali kwasoodpornej z tlenkowymi fazami aktywnymi, w rozkładzie NO, w warunkach gazów odlotowych elektrowni węglowej", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
216. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Formation of supported lipid bilayer on modification solid substrates", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014

217. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of cushion material and preparation conditions on the formation supported lipid bilayers", XIV<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications & 1<sup>st</sup> NanoBioMat Conf. Nanostructured Biocompatible/Bioactive Materials, Zakopane 2014
218. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of interactions of congo red with single-walled carbon nanotubes", Central European School on Physical Organic Chemistry, Przesieka 2014
219. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "How subtle differences in enzyme structures affect the reaction outcome? Theoretical studies on HMS and HPPD", Conf. Modelling and Design of Molecular Materials, Kudowa Zdrój 2014
220. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Air at hydrophobic solid surfaces and kinetics of the bubble collision", 15<sup>th</sup> Int. Conf. Surface Forces, Verbilki 2014
221. W.Zieliński, K.A.Wilk, G.Para, E.Jarek, K.Ciszewski, J.Palus, P.Warszyński "Synthesis and surface properties of new antielectrostatic soft cationic dichain surfactants", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Surfactants in Solution SIS 2014, Coimbra 2014
222. M.Zimowska, J.Gurgul, K.Łątka, J.Kryściak-Czerwenka, D.Napruszewska, R.P.Socha "Characterization of iron functionalized porous clay heterostructures derived from Laponite", V<sup>th</sup> Int. Workshop on Layered Materials, Mulhouse 2014
223. M.Zimowska, J.Gurgul, K.Łątka, Z.Olejniczak "Structural rearrangements of iron in Fe-PCH composites derived from Laponite – FTIR and Mössbauer spectroscopy comparative study", 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014
224. M.Zimowska, J.Gurgul, J.Olszówka, K.Łątka "Incorporation of tin into porous clay heterostructure: FTIR and Mössbauer spectroscopy comparative study", 46. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2014
225. M.Zimowska, J.Gurgul, J.Olszówka, K.Łątka, R.P.Socha "Characterization of functionalized PCH composites derived from laponite", 7<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC14, Dresden 2014
226. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero, M.Śliwa, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Selective hydrogenolysis of glycerol to 1,2-propanediol on the catalysts containing Cu-Ag phase deposited on oxide supports (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>)", 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Environmental Catalysis, Asheville 2014
227. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Kornas, M.Lachowska "Hydrogenolysis of glycerol to propylene glycol over Cu-Ag/oxides catalysts – role of the support and reaction conditions", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Air & Water Pollution Abatement Catalysis AWPAC, Kraków 2014
228. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Conformations of fibrinogen monolayers on latex particles: role of pH of adsorption", 4<sup>th</sup> Int. Colloids Conf., Madrid 2014

229. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Human Fibrinogen Adsorption on Latex Particles at pH 7.4 Studied by Electrophoretic Mobility and AFM Measurements", Conf. Frontiers of Polymer Colloids: From Synthesis to Macro-Scale and Nano-Scale Applications, Prague 2014

## WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. J.Barbasz "Interakcje nanocząstek z ludzkimi komórkami nowotworowymi", Instytut Fizyki Jądrowej PAN, Kraków
2. T.Borowski "Reaction mechanisms of mononuclear metalloenzymes and biomimetic systems – selected computational case studies", Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AV CR, Prague
3. Ł.Bratasz "Impact of heating historic churches on transfer and deposition of dust", Institute of Atmospheric Sciences and Climate CNR, Bologna
4. Ł.Bratasz "Impact of heating historic churches on transfer and deposition of dust", Institute of Atmospheric Sciences and Climate CNR, Padova
5. Ł.Bratasz "Impact of heating historic churches on transfer and deposition of dust", Univeristy College, London 2014
6. Ł.Bratasz "Klimat historyczny", Wydział Chemii UJ, Kraków
7. Ł.Bratasz "Przegląd wytycznych konserwatorskich", Narodowy Instytut Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów, Warszawa
8. J.Gurgul "Magnetyczne i elektronowe właściwości międzymetalicznych związków z grupy RERhSn, gdzie RE = lantanowiec". Instytut Fizyki Jądrowej PAN, Kraków
9. J.Gurgul "Spektroskopia XPS", Akademia Górniczo Hutnicza, Kraków
10. J.Korecki "Pierwszy polski synchrotron SOLARIS w badaniach materiałowych", Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH, Kraków
11. J.Korecki "Będzie światło! - polski synchrotron 'Solaris' 2015", Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Wrocławskiego, Wrocław
12. R.Kozłowski "Climate in museums and historic buildings and climate-related issues: physical damage, soiling and energy consumption - past and current research in Krakow", Institute of Atmospheric Sciences and Climate CNR, Bologna
13. R.Kozłowski "AE monitoring to study salt crystallization in porous stones and mortars", Victoria and Albert Museum, London
14. R.Kozłowski "Climate in museums and historic buildings and climate-related issues: physical damage, soiling and energy consumption - past and current research in Krakow", University College, London

15. M.Krzan "Stable and biodegradable aqueous particle laden biofoams for medical, cosmetic or industrial applications", Institute of Physical Chemistry BAS, Sofia
16. W.Łasocha "Strukturalna dyfraktometria proszkowa: historia, terażniejszość, perspektywy", XVI Międzynarodowe Targi Analityki i Technik Pomiarowych EuroLab, Warszawa
17. W.Łasocha "Strukturalna dyfraktometria proszkowa: historia, terażniejszość, perspektywy", Polskie Towarzystwo Chemiczne, Oddział Warszawski, Warszawa
18. W.Łasocha "Rozwiązywanie struktury krystalograficznej z dyfraktogramów proszkowych" Polskie Towarzystwo Krystalograficzne, Wrocław
19. M.Łukomski "Direct tracing of damage to support strategies for indoor climate management", Victoria and Albert Museum, London
20. M.Łukomski "Analiza mikrouszkodzeń w obiektach zabytkowych przy użyciu metod optycznych i akustycznych", Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Kraków
21. P.Nowak "Nietypowe zastosowania półprzewodników - niezwykła kariera ditlenku tytanu", Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych i Medycznych IFJ PAN, Kraków
22. D.Rutkowska-Żbik "Metaloporfiryny podglądane metodami kwantowochemicznymi", Zespół Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego, Wydział Chemii UJ, Kraków
23. D.Rutkowska-Żbik "Projekt NanoEIS: Nanotechnology Education for Industry and Society – propozycje dla szkół ponadgimnazjalnych", "Community of Lerner (CoL)" program IRRESISTIBLE, Wydział Chemii UJ, Kraków
24. M.Szaleniec, A.Dudzik, D.Knack, M.Witko, J.Heider "Enancjoselektywna hydroksylacja węglowodorów przez dehydrogenazę etylobenzenową. Obliczenia teoretyczne i eksperymenty izotopowe", Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej Politechniki Łódzkiej, Łódź
25. LSzyk-Warszyńska "Funkcjonalne, wielowarstwowe filmy polimerowe, właściwości i zastosowanie", Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wrocław
26. P.Warszyński "Functional multilayer films and microencapsulation", Universite de Geneve

## **WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW**

1. E.Broclawik "Chemia fizyczna II", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (14 godz.)
2. E.Broclawik "Chemia kwantowa makromolekuł", wykład dla studentów Wydziału Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ, Kraków (30 godz.)
3. A.Drelinkiewicz "Kataliza Heterogeniczna", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (8 godz.)



4. R.Grabowski "Kataliza, Kinetyka Reaktory", ", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków
5. J.Korecki "Wybrane zagadnienia i metody współczesnej fizykochemii", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków
6. J.Kryściak-Czerwenka "Wybrane zagadnienia i metody współczesnej fizykochemii - Spektroskopia w podczerwieni", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
7. J.Kryściak-Czerwenka "Wybrane zagadnienia i metody współczesnej fizykochemii - Spektroskopia Ramana", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
8. W.Łasocha "Osiągnięcia krystalografii i jej znaczenie w nauce", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
9. W.Łasocha "Metody krystalografii, parametry sieciowe", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
10. W.Łasocha "Metoda Rietvelda", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
11. P.Nowak "Kataliza", wykład dla słuchaczy projektu ISD MolMed IKiFP PAN, Kraków
12. P.Nowak "Metody", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków
13. P.Nowak "Chemia Powierzchni", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków
14. J.Połtowicz "Spektroskopia UV-Vis", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
15. J.Połtowicz "Kataliza homogeniczna", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
16. B.Sulikowski "Wstęp do spektroskopii NMR", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (4 godz.)
17. B.Sulikowski "Chemia Zeolitów", wykład dla studentów Wydziału Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej (16 godz.)
18. M.Szaleniec "Biokataliza", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (4 godz.)
19. M.Szaleniec "Metody - Chromatografia cieczowa i gazowa", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (4 godz.)

20. M.Szaleniec "Chromatografia cieczowa i gazowa w naukach przyrodniczych", wykład dla słuchaczy projektu ISD MolMed IKiFP PAN, Kraków (2 godz.)
21. P.Warszyński "Chemia fizyczna powierzchni", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (12 godz.)
22. P.Warszyński "Metody Optyczne", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, Kraków (4 godz.)

## **SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU**

### **WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI**

1. A.Armuła (Regionalny Punkt Kontaktowy Programów Ramowych, Centrum Transferu Technologii, Politechnika Krakowska) "Możliwości udziału Instytutu w nowym programie ramowym Unii Europejskiej Horizon 2020"
2. M.Brindell (Wydział Chemii UJ) "Funkcjonalizacja polipirydylowych kompleksów rutenu do zastosowań biomedycznych"
3. M.Chruszcz (South Carolina University) "Allergens – a structural biology prospective"
4. C.Claver (University Rovira & Virgili, Tarragona) "Metal Nanoparticles in Catalysis. The Nature of the Catalytic System"
5. M.Czubińska (Muzeum Narodowe w Krakowie) "Najstarsze plakaty krakowskie" [wykład wielkanocny]
6. E.Garcia-Lopez (University of Palermo) "Perspectives on Heterogeneous Photocatalytic Reactions: Some Case Studies"
7. A.Kraszewski (Instytut Chemii Bioorganicznej PAN) "Nowe koncepcje pronukleotydów anty-HIV"
8. K.Małek (Wydział Chemii UJ) "Potencjał badań z wykorzystaniem synchrotronowego źródła w podczerwieniu. Aktualne rozwiązania a synchrotron SOLARIS"
9. D.Markiewicz-Roszak, M.Wójtowicz (Regionalny Punkt Kontaktowy Programów Ramowych, Centrum Transferu Technologii, Politechnika Krakowska) "Możliwości udziału Instytutu w nowym programie ramowym Unii Europejskiej Horizon 2020"
10. M. Oleszkiewicz (Muzeum Etnograficznego im. Seweryna Udzieli w Krakowie) "Świat z opłatków na tle tradycji świąt Bożego Narodzenia, czyli od obrzędowego wystroju izby chłopskiej do dekoracji świątecznych na Boże Narodzenie" [wykład bożonarodzeniowy]
11. P.Paneth (Wydział Chemiczny Politechniki Łódzkiej) "Metody izotopowe w badaniach kinetycznych"

12. M.Przybylski (Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH) "ACMiN przedstawia i zaprasza – Nanotechnologia"

### **WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU**

1. B.Grzybowska-Świerkosz "Układy nanoAu/nosnik tlenkowy jako katalizatory reakcji utleniania (i nie tylko)"
2. A.Knera "Zamówienia publiczne"
3. J.Korecki "Granty Narodowego Centrum Nauki"
4. L.Krzemień "Dynamiczna odpowiedź mikrostrukturalna drewna na zmiany wilgotności względnej"
5. M.Mosiałek "Procesy zachodzące w ogniwach z elektrolitem ze stałego tlenku obserwowane na elektrodach quasi-punktowych"
6. A.Pajor-Świerzy "Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami"
7. D. Rutkowska-Żbik "Kwantowo-chemiczne badania właściwości i reaktywności wybranych pochodnych porfiryn"
8. B.Sulikowski "Ultrastabilne formy zeolitu typu Y – powstawanie i właściwości fizykochemiczne w świetle badań NMR i IR"
9. A.Szymańska "Poliokso metalany i perokso kompleksy jako materiały do zastosowań w katalizie, medycynie i przemyśle"

### **WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU**

1. J.Barbasz "Nauka i sport"
2. D.Rutkowska-Żbik "Czy wiesz, co żujesz? Chemia gumy do żucia"
3. M.Strojecki "Co słyhać w muzeum, czyli emisja akustyczna historycznych mebli i rzeźb z drewna"
4. B.Sulikowski "Fascynujące struktury trójwymiarowe - zeolity"
5. J.Szaleniec. M.Szalemieć "Zobaczyć niewidzialne, Chemia i fizyka w medycznej diagnostyce obrazowej"

### **UPOWSZECHNIANIE NAUKI**

1. M.Krzan "Pienimy się - na poważnie i na wesoło... czyli o wpływie detergentów na cywilizację XXI wieku", XII Letnie Spotkania z Nauką, Bałtycki Festiwal Nauki 2014, Czarlina

2. D.Rutkowska-Żbik "Jak maszyna wykrywa dotyk? Czyli o ekranach dotykowych słów kilka", Otwarty Uniwersytet Techniczny AGH, Kraków
3. J.Szaleniec, M.Szaleniec "Czekoladowa chemia", Otwarty Uniwersytet Techniczny AGH, Kraków
4. M.Szaleniec "Projekty Life-Science w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN", Dzień Otwarty Klastra Life Science, Kraków
5. M.Witko "Kobiety w nauce; wczoraj, dziś, jutro", Warsztaty MOL-Med. "Ludzie sukcesu", Kraków

## **UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE**

1. M.Derewiński
2. S.Dzwigaj (Universitew Pierre et Marie Curie Paris VI, Centre Nationale des Recherches Scientifiques, Paris)

## **DOKTORA HABILITOWANEGO**

1. Jacek Gurgul "Magnetyczne i elektronowe właściwości międzymetalicznych związków z grupy  $PERhSn$  (RE – lantanowiec)" (Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ)
2. W.Płaziński "Modelowanie teoretyczne procesu wiązania dwuwartościowych jonów metali przez alginiany oraz materiały sorpcyjne zawierające alginiany"

## **DOKTORA**

1. M.Grzesiak-Nowak "Polimery koordynacyjne oraz związki metaloorganiczne typu MOF - materiały dla katalizy, inżynierii krystalicznej" (promotor W.Łasocha)
2. M.Kopeć "Kompozytowe pokrycia antykorozyjne na osnowie żywic epoksydowych" (promotor P.Warszyński, P.Nowak)
3. J.Mizera "Katalizatory  $Au/MO_x$  czyste i domieszkowane w reakcjach utlenienia CO i węglowodorów" (promotor R.Grabowski)
4. M.Morga "Mechanisms of Nanoparticle Immobilization on Heterogeneous Surfaces Determined by Atomic Force Microscopy and Electronic Techniques" (promotor Z.Adamczyk)
5. E.Niedzialkowska "The influence of posttransatnal modifications on interactionbetween histone H3 and Survivin" (Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ)
6. M.Nosek "Application of Rotating Disk Electrode Technique in Colloidal Thin Films Studies" (promotor P.Weroński)

7. A.Pajor-Świerzy "Electroactive polyelectrolyte multilayer films containing nanoparticles" (promotor P.Warszyński)
8. A.Szymańska "Polyoxometalates and peroxocomplexes as materials for application in catalysis, medicine and industry" (promotor W.Łasocha)

## **KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT**

1. 46. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków, 19-21 marca 2014 (B.Sulikowski)
2. 3<sup>rd</sup> International Symposium on Air & Water Pollution Abatement Catalysis, Krakow, September 1<sup>st</sup>-5<sup>th</sup>, 2014 (M.Witko)
3. Seminarium Sprawozdawcze POIG FUNANO, Kraków, 21 października 2014 (Z.Adamczyk)
4. 5<sup>th</sup> Meeting X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow, May 14<sup>th</sup>-17<sup>th</sup>, 2014 (z Uniwersytetem Jagiellońskim) (R.Kozłowski, W.Łasocha)
5. International Symposium on Clean Energy from Ethanol, Rzeszów, July 28<sup>th</sup>-31<sup>st</sup>, 2014 (z Uniwersytetem Rzeszowskim) (A.Kowal)

## **IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE**

1. Festiwal Nauki "Z nauką przez wieki", Rynek Główny, Kraków 21-24 maja 2014 (N.Spiridis)
2. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 7 listopada 2014 (M.Nattich-Rak)

## **NAGRODY**

1. Trzecia nagroda w IX Konkursie na artykuł popularnonaukowy pod hasłem "Skomplikowane i proste. Młodzi uczeni o swoich badaniach" organizowanym przez miesięcznik "Forum Akademickie" (M.Strojecki "Szafa gra", Forum Akademickie, (2) (2014) 50-52)
2. Nagroda za "Najlepszy przykład praktycznego podejścia do otwartej innowacji" przyznana przez Forum współpracy dla rozwoju innowacji Life Science Open Space w konkursie organizowanym przez Klaster Life Science w Krakowie (M.Szaleniec) w Krakowie
3. Pierwsza nagroda w konkursie PROPAN 2014 za najbardziej produktowni instytut PAN w drugiej edycji konkursu organizowanego przez przez Krajową Reprezentację Doktorantów i Samorząd Doktorantów PAN

## WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

### Wypis 2/2015

**z protokołu 88. posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk – I. posiedzenia kadencji 2015-2018 w dniu 12.03.2015, dotyczący sprawozdania z działalności naukowej Instytutu w roku 2014**

#### Ad. 9 Sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu w roku 2014

Prof. Tomasz Borowski przedstawił sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu. Przypomniał, że Instytut ma status Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego na lata 2012-2017 w ramach Krakowskiego Konsorcjum Naukowego im. Mariana Smoluchowskiego „Materia, Energia, Przyszłość”. Przedstawił strukturę zatrudnienia, rodzaje studiów doktoranckich, ilość stażystów i magistrantów, strukturę i tematykę badań statutowych pogrupowanych w następujących działach:

- Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju (6 zadań),
- Fizykochemia powierzchni i nanostruktur – eksperyment i teoria (5 zadań),
- Nanostruktury materii miękkiej (4 zadania),
- Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury (1 zadanie).

Prof. Tomasz Borowski poinformował Radę, że działalność statutowa Instytutu została podsumowana na seminarium sprawozdawczym Instytutu, które odbyło się 6 lutego 2015, a następnie przedstawił i omówił:

1. Rodzaje projektów badawczych, realizowanych w ubiegłym roku w Instytucie, wraz ze źródłami ich finansowania: NCN (32), NCBiR (3), FNP (1), MNiSW (8), fundusze strukturalne UE (4), 7 program ramowy UE (2), projekty programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej (3), projekty na podstawie umów dwustronnych (1), COST (4, w tym jeden koordynowany przez Instytut).
2. Funkcjonowanie i współpracę w ramach KNOW.
3. Dorobek naukowy Instytutu:

– rozdziały w książkach	7
– artykuły w czasopismach międzynarodowych (JCR, lista A)	105
– artykuły w innych czasopismach (lista B)	5
– inne publikacje	6
– artykuły w recenzowanych materiałach konferencyjnych	7
– streszczenia w materiałach konferencyjnych	261
– wydawnictwa nakładem Instytutu (materiały konferencyjne – abstrakty)	3

i jego porównanie z latami poprzednimi oraz patenty i zgłoszenia patentowe.
4. Udział pracowników w konferencjach naukowych i wykładach a także mobilność doktorantów i pracowników w ramach programu „Erasmus+”.
5. Uzyskane tytuły i stopnie naukowe.
6. Otrzymane nagrody.
7. Zorganizowane konferencje naukowe.
8. Zorganizowane imprezy popularno-naukowe.
9. Główne osiągnięcia naukowe w roku 2014:
  - opracowanie nowych katalizatorów do produkcji bio-paliw,
  - nowe metody spektro-mikroskopowe w badaniach nanostruktur powierzchniowych,
  - mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości.

Dyskusja nad przedstawionym sprawozdaniem, w której udział wzięli: prof. Maria Nowakowska, prof. Stanisław Słomkowski, prof. Krzysztof Wędzony, dotyczyła:

- dobrej kondycji naukowej Instytutu, o czym świadczą harmonijny dorobek naukowy, badania podstawowe, zgłoszenia patentowe, uczestnictwo w KNOW oraz kształcenie kadry,
- publikacji Instytutu, których liczba jest bliska „stanowi nasycenia” z niewielkimi rocznymi fluktuacjami, a ich prawdopodobna ilość na koniec okresu sprawozdawczego pozwoli Instytutowi ubiegać się o kategorię A+,
- jakości prac prowadzonych w Instytucie, o czym może pośrednio świadczyć wzrost średniego IF publikacji Instytutu (choć nie ma automatycznego przeniesienia),
- obliczania IF za publikacje w poszczególnych czasopismach, które powinno znaleźć odniesienie do innych, niż chemia, dziedzin nauki np. fizyki lub medycyny,
- ilości wyjazdów zagranicznych, które mogą wpływać na efektywny czas pracy.

Przewodnicząca Rady, zamykając dyskusję zaproponowała wniosek stwierdzający, że Rada przyjęła z zadowoleniem postęp pracy naukowej. W jawnym głosowaniu oddano 30 głosów za przyjęciem wniosku i sprawozdania.

za zgodność z protokołem  
dr hab. Nika Spiridis  
Sekretarz Rady Naukowej IKiFP PAN