INSTYTUT KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA

POLSKIEJ AKADEMII NAUK

SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU W ROKU 2021

Kraków, marzec 2022

Spis treści

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA POLSKIEJ AKADEMII NAUK 5
ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2021 9
SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2021: 15
DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU 21
Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju 23
Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej 31
Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury 47
Grant Rozwojowy 51
Projekty badawcze NCN „Sonata Bis” 55
Projekty badawcze NCN „Sonata” 61
Projekty badawcze NCN „Opus” 67
Projekty badawcze NCN „Sonatina” 85
Projekty badawcze NCN „Preludium” 89
Projekty badawcze NCN „Beethoven” 95
Projekty badawcze NCN „Beethoven Life” 99
Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry” 103
Projekty badawcze NCN „GRIEG” 107
Projekty badawcze NCN „Miniatura” 111
Projekty badawcze NCBR „EIG CONCERT-JAPAN” 117
Projekty NCBR „TechMatStrateg” 121
Projekty NCBR „Program operacyjny Inteligentny Rozwój” 125
Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej 129
Programy HORYZONT 2020 137
Projekty akcji EU COST 143
Projekty NORWEGIAN RESEARCH COUNCIL 147
Projekty strukturalne funduszy Unii Europejskiej 151
Inne międzynarodowe projekty badawcze 155
Projekty programu Erasmus+ 159
Dorobek publikacyjny instytutu za rok 2021 163
PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM 165
UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH 194

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

Prowadzone badania

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, biotechnologii, technologii chemicznej, inżynierii materiałowej, a także mikrobiologii i medycyny. W centrum zainteresowań naukowych kadry Instytutu leży badanie molekularnych podstaw procesów katalitycznych a także zjawisk zachodzących na granicach fazowych gaz–ciało stałe, gaz–ciecz i ciecz–ciało stałe. W ostatnich latach bardzo intensywnie rozwijana jest również tematyka biotechnologiczna, poświęcona polimerom biodegradowalnym, jak również szeroko rozumiana tematyka nanotechnologiczna skierowana na opracowanie nowych nanomateriałów do zastosowań diagnostycznych i terapeutycznych. W Instytucie prowadzone są zarówno teoretyczne i doświadczalne badania podstawowe, które łączą się z badaniami o charakterze stosowanym, mającymi zastosowanie w procesach technologicznych.

Kadra Instytutu to ponad 120 pracowników, z których 87 jest bezpośrednio zaangażowanych w prowadzenie prac badawczych. Ponadto, w badaniach uczestniczy kilkudziesięciu doktorantów.

Statutowa działalność badawcza Instytutu obejmuje trzy podstawowe kierunki:

1. Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju
2. Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej
3. 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 zastosowania w formie izolowanych białek bądź mikroorganizmów do produkcji związków chemicznych o wysokiej wartości. Z kolei uzyskiwane na drodze fermentacji bioplastiki są badane pod kątem ich wykorzystywania jako biodegradowalne materiały jak i źródło optycznie czystych związków. 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 połączenie metod mechaniki i dynamiki molekularnej oraz chemii kwantowej jako narzędzi określania i charakteryzowania czynników strukturalnych i elektronowych mających wpływ na ukierunkowanie i selektywność procesów chemicznych leżących u podstaw badanych procesów katalitycznych. Modelowanie prowadzi się zarówno dla modeli klasterowych katalizatorów heterogenicznych i enzymów, jak również dla periodycznych modeli ciała stałego czy wielkoskalowych modeli białkowych (techniki QM:MM i QM:MM MD).

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. Badania w tej tematyce prowadzone są z wykorzystaniem zarówno technik eksperymentalnych (pomiary kinetyki adsorpcji lub dynamiki przepływu cząstek koloidalnych) jak

i teoretycznych (symulacje adsorpcji, symulacje ruchu pęcherzyków gazu w cieczy). 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. Ważnym aspektem jest również intensywny rozwój badań biologicznych oceniających potencjał biobójczy i cytotoksyczny otrzymywanych w Instytucie materiałów, które mogą znaleźć zastosowania w zwalczaniu mikroorganizmów lub komórek rakowych.

Rezultatami prowadzonych badań są osiągnięcia aplikacyjne obejmujące opracowanie nowych katalizatorów, rozwój narzędzi do symulacji molekularnych, wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych, opracowywanie nowych biotechnologicznych metod syntezy leków. W zakresie badań podstawowych głównymi osiągnięciami Instytutu w roku 2021 było m.in. opracowanie modelu teoretycznego oddziaływania antynowotworowej doksorubicyny z powierzchnią węglowych kropek kwantowych co umożliwiło ilościowy opis oddziaływań leku z nośnikiem i projektowanie selektywnego uwalniania leku. Ponadto opracowano wielowarstwowe nanonośniki lekowe typu core-shell o dodatkowej funkcjonalności diagnostycznej w ^{19}F-MRI. Biokompatybilność nanonośników została potwierdzona testami biologicznymi na liniach komórkowych zaś potencjał diagnostyczny został potwierdzony za pomocą obrazowania metodą magnetycznego rezonansu jądrowego.

W zakresie badań o charakterze aplikacyjnym należy wymienić dalsze udoskonalenia zintegrowanej platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie kulturowym HERIe, w której zaimplementowano cztery moduły służące do oceny utraty wartości zbiorów na skutek degradacji chemicznej, pożarów, zanieczyszczeń gazowych oraz zmian barwy spowodowanej światłem, oraz odkrycie nowej aktywności hydrogenazy dla wolframowej oksydoreduktazy aldehydu (AOR) co umożliwiło opracowanie systemu syntezy aldehydów z kwasów karboksylowych oraz nowego systemu odtwarzania NADH.

Istotnym osiągnięciem o znaczeniu gospodarczym było uruchomienie demonstracyjnej linii biorafinerii w hali przy ul. Balickiej 100 w Krakowie i przeskalowanie na skalę techniczną procesu produkcji polimeru mclPHA z *P. putida* CA3 oraz PHB z *Z. denitirficans MW1*.

Instytut posiada bardzo dobre, a w niektórych przypadkach unikatowe w skali krajowej, zaplecze aparaturowe. W roku 2020 rozpoczął również budowę demonstracyjnej instalacji biorafinerii w ramach projektu TechMatStrateg, której zakończenie przewidywane jest na jesień 2022. W badaniach wykorzystuje się także aparaturę wspólnych laboratoriów międzyinstytutowych.

Kształcenie

Instytut prowadził w 2021 roku studia trzeciego stopnia - studia doktoranckie w ramach Międzynarodowych Studiów Doktoranckich (MSD) i finansowane w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój (POWER) ze środków Unii Europejskiej: Środowiskowe Studia Doktoranckie InterDokMed - Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej i Interdyscyplinarne Środowiskowe Studia Doktoranckie FCB - Fizyczne, Chemiczne i Biofizyczne Podstawy Nowoczesnych Technologii i Inżynierii Materiałowej (koordynowane przez AGH). W 2021 roku Instytut kształcił doktorantów również w ramach szkoły doktorskiej – Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkoły Doktorskiej we współpracy z Instytutem Fizyki Jądrowej PAN, Instytutem Farmakologii PAN, Instytutem Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN oraz Akademią Górniczo-Hutniczą oraz w ramach szkoły doktorskiej – Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych we współpracy z Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Instytutem Agrofizyki im. Bohdana Dobrzańskiego PAN, Instytutem Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa -

Państwowym Instytutem Badawczym i Akademią Górniczo-Hutniczą im. Stanisława Staszica w Krakowie.

Instytut uczestniczy w europejskim programie wymiany naukowej studentów i pracowników naukowych Erasmus plus oraz w programie wpierania wymiany akademickiej PROM finansowanym przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej.

Współpraca krajowa i międzynarodowa

Instytut szczyci się wieloletnią tradycją w organizowaniu i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni w Polsce. Od ponad pięćdziesięciu 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, Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni, Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych i Medycznych, Narodowe Laboratorium Badania Powierzchni, Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej SPINLAB oraz Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej. MLKBE w roku 2021 poszerzyło swoją bazę działania podpisując umowę o współpracy z AGH oraz przyjmując jako nowego członka laboratorium Instytut Biologii Uniwersytetu Pedagogicznego w Krakowie.

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.

Instytut prowadzi szeroką współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w licznych porozumieniach o współpracy bilateralnej, 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 2021 roku w jednym programie).

Popularyzacja nauki

Ze względów pandemicznych Instytut w roku 2021 nie odbył się Dzień Otwarty, który były skierowany do uczniów ze szkół podstawowych i średnich.

Pracownicy Instytutu brali jednak czynny udział w wirtualnych przedsięwzięciach organizowanych przez Klaster Life-Science (np. Life Science Open Space).

ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2021

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju **23**

1. Wpływ modyfikacji tlenku molibdenu na efekty cieplne procesów z tworzeniem brązów wodorowych 25
2. Badania doświadczalne i obliczeniowe nad wybranymi enzymami o potencjale aplikacyjnym 26
3. Nowe perokso- oraz poliokso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania 27
4. Badania efektów strukturalnych i wpływu charakteru nośnika na aktywność katalizatorów miedziowych 28
5. Nowe materiały katalityczne dla procesów „ zielonej chemii” 29

Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej **31**

6. Mechanizmy i kinetyka immobilizacji białek na powierzchniach ciało stałe/elektrolit oraz określenie mechanizmu tworzenia koron białkowych na powierzchni nanocząstek dla układu mioglobina/lateks 33
7. Monowarstwy nanocząstek plazmonicznych o kontrolowanej strukturze oraz regulowanych właściwościach elektrokinetycznych 34
8. Właściwości fizykochemiczne i mechaniczne układów „bio” 35
9. Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni 36
10. Cząsteczki o znaczeniu biologicznym w kontekście oddziaływania z powierzchnią oraz doskonalenia ich opisu teoretycznego 37
11. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych 38
12. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe 39
13. Teranostyczne nanocząstki substancji przeciwnowotworowych 40
14. Kinetyka wyciekania filmów ciekłych w warunkach dynamicznych – eksperyment i modelowanie teoretyczne 41
15. Opracowanie układu eksperymentalnego do badania zjawisk powierzchniowych na ciekłych granicach faz w warunkach statycznych 42
16. Hydrożelowe mikrokapsułki z nanostrukturalnymi powłokami 43
17. Nowe materiały katodowe do wysokotemperaturowych ogniw paliwowych o obniżonej temperaturze pracy 44
18. Badania właściwości fizykochemicznych funkcjonalnych nanonośników na bazie dendrymerów oraz białek 45

Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury **47**

19. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki środowiska w ich otoczeniu 49

Grant Rozwojowy **51**

20. Zastosowanie nanomateriałów do wytwarzania warstw przewodzących na stykach elektroenergetycznych 53

21. Zeolity o strukturze fojazytu jako modyfikatory ANFO 54

Projekty badawcze NCN „Sonata Bis” **55**

1. Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu w biosyntezie alkaloidów o aktywności farmakologicznej - struktury, mechanizmy reakcji i racjonalne przeprojektowywanie enzymów 57

2. Pole siłowe mechaniki molekularnej dla badania struktury, dynamiki oraz konformacji węglowodanów zawierających jednostki furanozowe 58

3. Synergistyczne efekty mieszanych roztworów bit-surfaktantów w stabilności filmów ciekłych w warunkach dynamicznych- badania podstawowe o potencjale aplikacyjnym we flotacyjnym procesie separacji 59

Projekty badawcze NCN „Sonata” **61**

1. Wpływ struktury krystalograficznej ZrO_2 na aktywność katalizatorów Cu/ZrO_2 i Cu/ZrO_2-ZnO domieszkowanych Ga, Mn i Ni w reakcji niskotemperaturowego reformingu parowego bio-etanolu 63

2. Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów 64

3. Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali 65

Projekty badawcze NCN „Opus” **67**

1. Magnetyczne nanocząstki na periodycznych matrycach tlenków żelaza: stabilizacja magnetyzmu i jego kontrola zewnętrznym polem elektrycznym 69

2. Opracowanie nowoczesnej technologii wytwarzania stabilnych biologicznych filmów powierzchniowych o właściwościach drobnoustrojobójczych i leczniczych 70

3. Mechanizm regioselektywnego utleniającego odwodornienia 3-ketosteroidów przez dehydrogenazę Δ^1-cholest-4-en-3-onu ze *Sterolibacterium denitrificans* 71

4. Teoretyczne i doświadczalne badania mechanizmu reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów katalizowanej przez hierarchiczne materiały zeolitowe zawierające wanad 72

5. Wpływ przeciwjonów na tworzenie i funkcjonalność membran polielektrolitowych 73

6. Dendrymery jako platforma do projektowania biologicznie czynnych nośników 74

7. W poszukiwaniu efektywnych i przyjaznych środowisku spieniaczy i emulgatorów – ilościowy opis stabilności cienkich filmów ciekłych w roztworach "zielonych" surfaktantów 75

8. Surfaktanty i kopolimery czułe na zmiany pH jako komponenty do tworzenia nanonośników 76

9. Badania oddziaływania nanorurek węglowych z telomerycznym DNA przy użyciu metod dynamiki molekularnej 77

10. Biopolimery jako templaty do otrzymywania nanostrukturalnych materiałów hydrotalkitopodobnych i ich kalcynowanych pochodnych do zastosowań katalitycznych 78

11. Nowe biomateriały zawierające polisacharydy jako efektywna platforma do adsorpcji i uwalniania czynników wzrostu fibroblastów: zastosowania w diagnostyce i w leczeniu chorób cywilizacyjnych 79

12. Nowe kompozyty smektytów z nanocząstkami TiO_2 otrzymanymi metodą odwróconej mikroemulsji do zastosowań fotokatalitycznych 80

13. Gruboziarniste modelowanie węglowodanów 81

14. Funkcjonalne warstwy i nanostruktury otrzymywane przy pomocy epitaksji z wiązek molekularnych wspomaganej zewnętrznymi czynnikami 82

15. Teranostyczne nanonośniki nowej generacji dla detekcji, diagnostyki i neuroprotekcyjnego leczenia niedokrwiennych uszkodzeń mózgu 83

16. Badania nad kooperacją jonów metali w dwuatomowych centrach złożonych z jonów metali przejściowych 84

Projekty badawcze NCN „Sonatina” 85

1. Multifunkcjonalne kompozytowe powłoki chitozanowe dla biodegradowalnych stopów Mg 87

Projekty badawcze NCN „Preludium” 89

1. Wpływ kontrolowanego czasu adsorpcji na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości 91

2. Wolframowa oksydoreduktaza aldehydu z *Aromatoleum aromaticum* – badania mechanizmu reakcji katalitycznej 92

3. Analiza wpływu wybranych czynników na zmiany struktury α-synukleiny 93

4. Opracowanie racjonalnych wytycznych środowiskowych na potrzeby krótko-trwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych w budynkach zabytkowych 94

Projekty badawcze NCN „Beethoven” 95

1. Dynamika ściany domenowej i właściwości magnetycznej tekstury w warstwach magnetycznych z oddziaływaniem typu Dzyaloshinskii-Moriya 97

Projekty badawcze NCN „Beethoven Life” 99

1. Struktura i funkcja enzymów glicynowo-rodnikowych katalizujących addycję do fumaranu: biochemia, modelowanie i zastosowanie 101

Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry” 103

1. SolarMethaChem: Procesy wywołane światłem słonecznym dla fotochemicznej konwersji metanu 105

Projekty badawcze NCN „GRIEG” 107

1. Craquelure – Model obrazów ze spękaniami wspierający ustalenie racjonalnych wytycznych środowiskowych w muzeach 109

2. Teranostyczne nanonośniki dla dostarczania leków w chorobach centralnego układu nerwowego 110

Projekty badawcze NCN „Miniatura” 111

1. Poszukiwanie nowych ketosteroidowych dehydrogenaz bakteryjnych katalizujących utleniające odwodornienie steroidów 113

2. Ultradźwiękowa synteza zeolitów o strukturze fojazytu jako katalizatorów do reakcji dekarbonylacji furfuralu do furanu 114

3. Badania wstępne wpływu domieszkowania stopów magnezu pierwiastkami ziem rzadkich na mechanizmy korozji i jej przeciwdziałania przez inhibitory nieorganiczne 115

4. 'Confinement effect' - 5-fluorouracyl w mezoporach 116

Projekty badawcze NCBR „EIG CONCERT-JAPAN” 117

1. Wielofunkcyjne, wysokosprawne materiały: porowate materiały kompozytowe do procesów membranowych 119

Projekty NCBR „TechMatStrateg” 121

1. Technologia biorafinacji olejów roślinnych do wytwarzania zaawansowanych materiałów kompozytowych 123

Projekty NCBR „Program operacyjny Inteligentny Rozwój” 125

1. CULDIGI - Projekt zintegrowanego systemu cyfryzacji, katalogowania i dokumentacji dziedzictwa kulturowego (obrazów oraz artefaktów 2D) 127

Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej 129

1. PROM Międzynarodowa wymiana stypendialna doktorantów i kadry akademickiej 131

2. Program Polskie Powroty - CRAQUELURE 132

3. Selektywne utlenianie metanu do metanolu na katalizatorach zeolitowych z wprowadzonymi jonami metali 133

4. “Inteligentne” warstwy powierzchniowe ciecz-gaz wytworzone na bazie foto-aktywowanych surfaktantów oraz ich rola w stabilizowaniu interaktywnych pian 134

5. Zrozumienie molekularnych aspektów procesu nieprawidłowego fałdowania białek: badania *in situ* spektroskopowe i mikroskopowe 135

6. Dynamiczne nanostruktury powierzchniowe na poruszających się granicach międzyfazowych ciecz/gaz i ciecz/ciecz 136

Programy HORYZONT 2020 137

1. CollectionCare - Innowacyjne i ekonomiczne usługi monitorowania indywidualnych obiektów dziedzictwa kultury dla potrzeb prewencji konserwatorskiej w trakcie ekspozycji, przechowywania, manipulowania i transportu 139

2. IPERION-HS - Zintegrowane platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie 140

3. NanoPaInt - Dynamika gęstych nanosuspensji: droga do nowych funkcjonalnych materiałów 141

Projekty akcji EU COST 143

1. Obliczeniowa chemia materiałowa dla wydajnego procesu rozkładu wody na nanokryształach zbudowanych z pierwiastków nieszlachetnych 145

Projekty NORWEGIAN RESEARCH COUNCIL 147

1. Zrównoważone zarządzanie budynkami zabytkowymi w perspektywie długookresowej 149

Projekty strukturalne funduszy Unii Europejskiej 151

1. Środowiskowe Studia Doktoranckie „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej” (InterDokMed) 153

2. Interdyscyplinarne Środowiskowe Studia Doktoranckie „Fizyczne, Chemiczne i Biofizyczne Podstawy Nowoczesnych Technologii i Inżynierii Materiałowej” (FCB) 154

Inne międzynarodowe projekty badawcze **155**

1. Biokompatybilne piany i emulsje stabilizowane naturalnymi surfaktantami i cząsteczkami do zastosowań biomedycznych 157

2. Biokompatybilne emulsje i piany stabilizowane cząstkami stałymi do zastosowań biomedycznych 158

Projekty programu Erasmus+ **159**

PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM **165**

UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH **194**

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2021:

realizowano:	21 statutowych zadań badawczych 41 projektów badawczych (grantów) NCBR, NCN 1 projekt UE COST Action 3 projekty UE H2020 2 projekty Funduszy Strukturalnych UE 1 projekt Norweskiej Rady Badań 11 innych projektów międzynarodowych
opublikowano:	1 rozdział w monografiach 168 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy JCR 5 publikacji w innych czasopismach, 100 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	2 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wygłoszono i zaprezentowano:	117 referatów (w tym 17 referaty plenarne i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 57 posterów
otrzymano:	1 patent
we współpracy z zagranicą:	opublikowano 69 wspólnych prac w czasopismach naukowych ogłoszono 49 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 14 wyjazdów pracowników i doktorantów Instytutu za granicę (Erasmus+ oraz NAWA PROM)
zorganizowano:	4 konferencji i posiedzeń naukowych
uzyskano:	Tytuł naukowy profesora – 2 osoby Stopień doktora habilitowanego – 3 osoby Stopień doktora - 9 osób

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2021

– wyniki uzyskane w ramach projektów/ zadań badawczych

Opracowanie modelu teoretycznego oddziaływania leku przeciwnowotworowego z węglowymi kropkami kwantowymi

Zrozumienie mechanizmu oddziaływania antynowotworowej doksorubicyny DOX z powierzchnią węglowych kropek kwantowych CQD jest krokiem do opracowania nowych nośników leków. Opracowano teoretyczny model CQD zawierający protyczne grupy powierzchniowe i przebadano oddziaływania z DOX, ilościowo opisując rolę oddziaływań elektrostatycznych i wiązań wodorowych w zależności od pH oraz typu funkcjonalizacji powierzchni CQD. Zaobserwowana zmiana charakteru oddziaływań wraz ze zmianą pH z obojętnego na kwaśne pozwoli na projektowanie nośników selektywnie uwalniających lek.

Opracowanie teranostycznych nanonośników substancji przeciwnowotworowych

Celem badań było opracowanie nanonośników leków przeciwnowotworowych pełniących również funkcje diagnostyczne. Lek przeciwnowotworowy (5-fluorouracyl) został umieszczony w wielowarstwowych nanonośnikach typu core@shell (80-200 nm) zbudowanych z poliaminokwasów poli(L-lizyny), poli(kwasu glutaminowego) – PGA, oraz podstawionego pegiem-PGA – PGA-g-PEG. Biokompatybilność nanonośników oraz aktywność przeciwnowotworową kapsułkowanego leku potwierdzono testami biologicznymi z MTT, zaś potencjał diagnostyczny za pomocą obrazowania metodą magnetycznego rezonansu jądrowego (^{19}F-MRI).

– najważniejsze w roku sprawozdawczym osiągnięcie działalności naukowej jednostki o znaczeniu ogólnospołecznym lub gospodarczym

Budowa demonstracyjnej biorafinerii do produkcji bioplastików

Celem projektu było opracowanie technologii produkcji na skalę techniczną bakteryjnych bioplastików oraz konstrukcja demonstracyjnej linii biorafinerii. W tym celu zaadaptowano na halę na ul. Balickiej 100 w Krakowie, którą wyposażono w fermentory (5-200 L), stanowiska do suszenia biomasy, ekstrakcji i oczyszczania plastiku. Na skalę techniczną przeskalowano proces produkcji polimeru mclPHA z *P. putida* CA3 oraz PHB z *Z. denitirficans MW1* oraz opracowano formulacje z uzyskanych polimerów do kontrolowanego dostarczania leków.

– zastosowanie wyników badań naukowych lub prac rozwojowych o znaczeniu społecznym i gospodarczym; działania zwiększające innowacyjność

Zintegrowane platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie - rozwój wdrożonego systemu - projekt IPERION HS

Udoskonalono narzędzie HERIe pozwalające szacować ryzyko uszkodzeń mechanicznych obiektów dziedzictwa kulturowego pod wpływem zmian środowiskowych. Zaimplementowano 4 moduły: 1) “degradacji chemicznej” dla papieru, drewna, tkanin i tworzyw sztucznych, 2) “pożarowy” pozwalający obliczać przewidywaną utratę wartości zbioru na skutek pożaru, 3) “moduł do obliczeń stężenia zanieczyszczeń gazowych w pomieszczeniach” w oparciu o stężenia zanieczyszczeń oraz parametry wentylacyjne i konstrukcyjne pomieszczeń muzealnych oraz 4)

"kalkulator zmiany barwy spowodowanej światłem" dla kilkudziesięciu barwinków używanych w obiektach dziedzictwa. HERIe jest elementem europejskiej cyfrowej platformy prewencji konserwatorskiej.

Odkrycie nowej aktywności hydrogenazy dla wolframowej oksydoreduktazy aldehydu (AOR) z *Aromatoleum aromaticum* – efekt grantu PRELUDIUM

AOR katalizuje reakcję utlenienia aldehydów do kwasów karboksylowych i w bakteriach pełni rolę detoksykacji metabolitów aldehydowych w szlakach degradacji aminokwasów. Niespodziewanie odkryto, że enzym, w obecności H_2 jako jedynego donora elektronów, katalizuje redukcję kwasów karboksylowych do aldehydów oraz NAD^+ do NADH. Odkrycie nowej hydrogenazy oraz ustalenie jej struktury metodą CRYO-EM ma doniosłą rangę w zakresie podstawowym jak i aplikacyjnym, ze względu na przemysłowy potencjał obu procesów katalitycznych. Obecnie trwają przygotowania do rozszerzenia ochrony wynalazku na arenie międzynarodowej oraz testy wdrożeniowe.

INNE WAŻNE OSIĄGNIECIA W ROKU 2021:

W roku 2021 zorganizowano 4 konferencje, wszystkie w trybie on-line.

Niestety, podobnie jak w roku 2020, z powodu pandemii COVID-19 i związanych z nią restrykcjami planowane imprezy popularno-naukowe tzn. coroczny Dzień Otwarty Instytutu oraz udział w Krakowskim Festiwalu Nauki, nie odbyły się.

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych

- LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (LIII Polish Annual Conference on Catalysis), Kraków 22-24 września 2021 (M. Witko, D. Rutkowska-Żbik) on-line
- 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface 6-9 czerwca 2021, Kraków (G. Mordarski) on-line
- 34th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics Zakopane 27-29 listopada 2021 (J. Barbasz-IKiFP PAN, Wydział Fizyki UJ, Mark Kac Complex System Research Center) on-line
- Life Science Open Space Online Week 2021, Kraków 23-26 listopada 2021 (Klaster LifeScience Kraków, M. Guzik-IKiFP PAN (*organizacja jednej z sesji*))

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1. Wpływ modyfikacji tlenku molibdenu na efekty cieplne procesów z tworzeniem brązów wodorowych

(prof. Alicja Drelinkiewicz, dr Robert Kosydar, dr Erwin Lalik, dr hab. Aleksandra Pacuła)

Cel badań. Celem badań w układach $Pd/W_xMo_yO_3$ (Pd = 0.5 - 4 wt%) było określenie ich aktywności i stabilności w cyklicznie prowadzonych egzotermicznych procesach redukcji i reutleniania, pod kątem wykorzystania jako źródła ciepła.

Synteza i charakterystyka próbek. W badaniach stosowano zarówno Pd/MoO_3, Pd/WO_3 jak i kompozyty $Pd/W_xMo_yO_3$ o zmiennej zawartości Pd (0.5, 1 i 4 wt %). Nośnik $W_xMo_yO_3$ otrzymano metodą hydrotermalną (150^0C, 2 h) stosując Na_2WO_4 x 2 H_2O, $(NH_4)_6Mo_7O_{24}$ $4H_2O$, 30% H_2O_2, HCl a następnie kalcynacja w 600°C, 2h. Uzyskano krystaliczny materiał (XRD) dla którego obrazy SEM pokazały morfologię zbliżoną do tlenku WO_3, (sferyczne mirokrystality), a całkowicie odmienną od płytkowej morfologii MoO_3 (Fig. 1). Analiza EDS pokazała równomierny rozkład W i Mo w kompozycie skutkujący stosunkiem atomowym W/Mo = 1.5 ($W_{0.6}Mo_{0.4}O_3$), potwierdzonym również metodą XPS.

Osadzanie nanocząstek Pd uzyskano metodą impregnacji z roztworu $Pd(Ac)_2$ w acetonie i redukcji H_2 (250 °C, 2 h). Metodą tą uzyskano również katalizatory Pd/WO_3 (0.5 i 1 wt% Pd). Analiza TPR-H_2 dla impregnowanych preparatów pokazała bardzo podobne zachowanie $1\%Pd/WO_3$ i $1\%Pd/W_{0.6}Mo_{0.4}O_3$, całkowicie odmienne od redukcji $1\%Pd/MoO_3$. Metoda ta jak i analiza XPS potwierdziły całkowitą redukcję jonów Pd^{2+} w 250^0C. Metody XRD, SEM, EDS potwierdziły, że katalizatory zawierające Pd są nadal krystaliczne, brak zmian w rozkładzie i ilości W i Mo (W/Mo = 1.5).

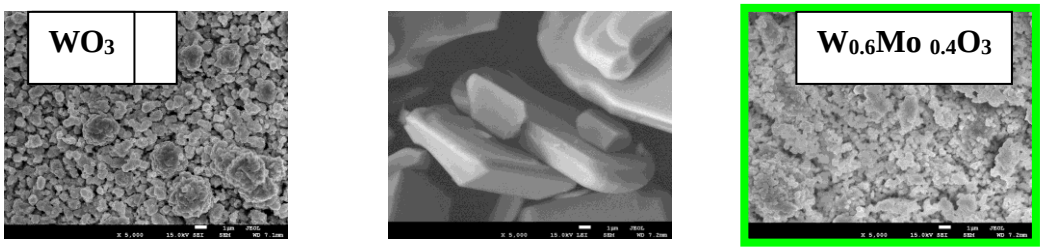


Fig. 1 Zdjęcia SEM badanych materiałów

Efekty cieplne. Metodą mikrokalorymetrii przepływowej stwierdzono, że redukcja katalizatorów prowadziła do utworzenia brązów wodorowych, odpowiednio $H_{1.9}MoO3$ (Q ~100 kJ/mol H_2), $H_{0.30}WO_3$ (Q ~50 kJ/mol H_2) i $H_{0.32}W_{0.6}Mo_{0.4}O_3$ (Q ~80 kJ/mol H_2). Uzyskana stechiometria brązów (H/MO_3) dla układów Pd/MoO_3 i Pd/WO_3 jest zgodna z literaturą.

Badania metodą mikrokaloyremtrii obejmowały również przeprowadzanie cyklicznych procesów redukcji (H_2 5%/N_2, w zakresie temp. 25 - 105^0C) i reutleniania (powietrze syntetyczne, temp. 25^0C). W procesie redukcji tworzyły się brązy H_xMO_3 z wydzieleniem ciepła, w procesie reutleniania zachodziła egzotermiczna regeneracja tlenku z utworzeniem wody. Wszystkie katalizatory na osnowie $W_{0.6}Mo_{0.4}O_3$ pracowały stabilnie. Niezależnie od zawartości Pd, uzyskano średnie wartości H/(W+Mo) w zakresie 0.31-0.4, i ciepło tworzenia brązów 80-87 kJ/mol H_2. Proces redukcji prowadzony w podwyższonej temperaturze (55^0C, 105^0C) prowadził do wyższych wartości H/W+Mo, efektu takiego nie obserwowano dla układów na osnowie WO_3, MoO_3

Podsumowanie. Otrzymane materiały kompozytowe zawierające mikrokrystaliczny $W_{0.6}Mo_{0.4}O_3$ wykazały zdolność do tworzenia brązów wodorowych, o stechiometrii podobnej do WO_3, ale z wydzieleniem większej ilości ciepła. Charakteryzowała je stabilna praca w szeregu cykli redukcji i reutleniania, potwierdzone w 30 cyklach dla $1\%Pd/W_{0.6}Mo_{0.4}O_3$.

2. Badania doświadczalne i obliczeniowe nad wybranymi enzymami o potencjale aplikacyjnym

(prof. dr hab. Tomasz Borowski, dr Maciej Guzik, dr Sangita Kachhap, dr Anna Miłaczewska, dr inż. Mateusz Tataruch, prof. dr hab. Maciej Szaleniec, dr Agnieszka Wojtkiewicz, mgr Justyna Andrys, mgr Anna Kluza, mgr Justyna Prajsnar, mgr Zuzanna Wojdyła)

a) W badaniach nad nowymi dehydrogenazami 3-ketosteroidowymi (KstD) z *Mycobacterium bovis* dokonano izolacji enzymów KstD z DNA *M. bovis* BCG (szczep szczepionkowy) oraz *M. bovis* wyizolowanego od pacjenta. W obu przypadkach enzymy okazały się być tym samym wariantem znanej KstD charakterystycznej dla *M. tuberculosis*. Produkty białkowe okazały się być nierozpuszczalne i nie wykazał aktywności enzymatycznej. Planowane są nowe podejścia do opracowania efektywnego systemu nadekspresji.
b) W badaniach koncentrujących się na optymalizacji warunków produkcji i oczyszczania białek (Rhlb, dwóch homologów DODA, EctC, DIOX4, DIOX5, DIOX6), finalnie celem poszukiwania warunków ich krystalizacji, udało się opracować protokoły produkcji białek *P. somniferum* DIOX, *E. coli* DODA oraz *B. vulgaris* DODA, przy czym białka DIOX oraz DODA z *B. vulgaris* były produkowane jako białka fuzyjne z MBP. We wszystkich przypadkach otrzymano wystarczającą ilość czystego preparatu białkowego pozwalającego do przystąpienia do prób krystalizacji białek. Wszystkie podjęte próby otrzymania białka rekombinowanego Rhlb w *E. coli* zakończyły się niepowodzeniem – mimo udanej nadekspresji w bakteriach nie udało się uzyskać białka Rhlb na etapie oczyszczania w żadnym z zastosowanych wariantów (użycie białek opiekuńczych tzw. chaperonów, połączenie z białkiem MBP zwiększającym rozpuszczalność, użycie różnych szczepów E.coli).
c) Przeprowadzone próby krystalizacji badanych białek zakończyły się sukcesem dla białek: *E. coli* DODA, *B. vulgaris* DODA oraz *P. somniferum* CODM. Dla części otrzymanych kryształów zebrano już zestawy danych dyfrakcyjnych na wiązkach synchrotronowych BESY II oraz PETRA III, dla pozostałych kryształów dane zostaną zebrane końcem marca br. Dane dyfrakcyjne pozwoliły na rozwiązanie struktur krystalicznych metodą podstawienia cząsteczkowego, a otrzymane modele są obecnie udokładniane. W przypadków białek DODA z *E. coli* oraz *B. vulgaris* trwają dalsze prace nad kokrystalizacją białek w kompleksie z ich ligandami.
d) Celem prowadzonych badań obliczeniowych było wyznaczenie struktury kompleksów enzym-substrat oraz mechanizmów reakcji cyklizacji katalizowanych przez enzymy EctC oraz CAS. Przeprowadzone symulacje dynamiki molekularnej dla kompleksów enzym-substrat dostarczyły wglądu w możliwe niskoenergetyczne konformacje substratu i reszt białkowych z nim oddziałujących. W przypadku EctC, badane są dwa modele różniące się geometrią miejsca aktywnego oraz sposobem oddziaływania żelaza z ligandami: w modelu pierwszym, bazującym na dostępnej literaturze, żelazo jest 4-koordynacyjne, posiada geometrię tetraedryczną; w modelu drugim, żelazo jest 6-koordynacyjne i ma geometrię oktaedryczną. Dotychczasowe obliczenia pozwalają przypuszczać, że model 1 należy odrzucić ze względu na wysoką barierę energetyczną towarzyszącą cyklizacji substratu. Badania nad modelem drugim są w toku. Dla CAS zidentyfikowano dwie możliwe pozycje substratu (proklawaminianu) względem centrum aktywnego. W pierwszej z nich atomy, między którymi tworzy się nowe wiązanie są prezentowane do centrum aktywnego, zgodnie z typowym przewidywanym mechanizmem cyklizacji katalizowanej przez ODD. Druga, natomiast, wymaga reorientacji cząsteczki substratu. Dwa kompleksy stanowią punkt wyjścia do dalszego modelowania metodami QM/MM, których celem jest określenie, czy jedna z pozycji jest bardziej sprzyjająca dla reakcji oraz opisanie roli reorientacji substratu dla selektywności reakcji.

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

(prof. dr hab. Wiesław Łasocha, dr Łukasz Kuterasiński, mgr Adrianna Sławińska)

Prowadzone prace dotyczyły syntezy, badań strukturalnych i fizykochemicznych nowych organiczno-nieorganicznych peroksomolibdenianów oraz polioksomolibdenianów. Najważniejsze kierunki prowadzonych badań i uzyskane rezultaty przedstawiono poniżej.

1) Przeprowadzono szereg syntez z użyciem różnych izomerów cykloheksanoaminy. Stosowano syntezy pod chłodnicą zwrotną oraz z użyciem autoklawów. Przeprowadzono badania dla roztworów zakwaszanych kwasem solnym lub octowym. Otrzymane fazy stałe badano przy użyciu metod dyfrakcji proszkowej oraz analizy elementarnej.

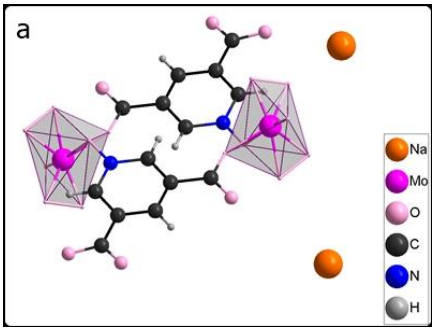
2) Badano możliwości syntez z udziałem 30% H_2O_2, związków Mo(VI) oraz kwasów dikarboksypirydynowych. Uzyskano szereg preparatów związków oksodiperokso- z kationami sodowymi. Związki z kationami potasowym i amonowym syntezowano dla celów badań fizykochemicznych, głównie katalitycznych i farmakologicznych.

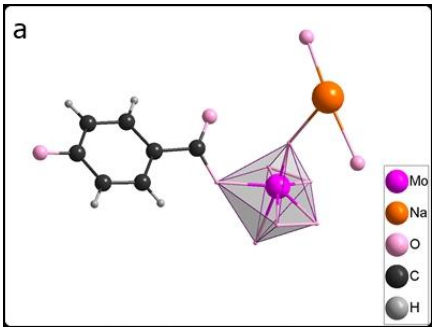
3) Przeprowadzono rozwiązywanie i udokładnianie struktur krystalicznych soli sodowych oksodiperoksomolibdenianu 2,6-dikarboksypirydyny (**1**), oraz oksodiperoksomolibdenianu 3,5-dikarboksypirydyny (**2**). Dane krystalochemiczne i rysunki są przedstawione poniżej.

4) Dla wyselekcjonowanych preparatów z grup poliokso oraz peroksomolibednianów przeprowadzono testy katalitycznego utleniania cyklicznych węglowodorów, oraz cykloheksanonu w reakcji Baeyera-Villigera (**BV**). W reakcji **BV** zauważono bardzo wysoką selektywność niektórych peroksozwiązków karboksypirydyny do ε-kaprolaktonu (>90%).

5) Wybrane peroksozwiązki były badane w CM UJ w ramach testów farmakologicznych na liniach komórek nowotworowych. Najlepsze preparaty wykazują aktywność porównywalną z aktywnością cis-platyny stosowanej w praktycznych terapiach w medycynie.

Poniższy rysunek przedstawia jednostki asymetryczne dla związków **1** i **2**. Kule o kolorach: magenta, czarny, niebieski i różowy oznaczają Mo, C, N i O, żółte duże kule oznaczają atomy Na.

1) 

2) 

Dane krystalochemiczne:

(**1**) $Na_2[MoO(O_2)_2C_5H_3NO(COO)(COOH)]_2 .2H_2O$,

SG P-1, a,b,c,αβγ; 12.2307(7), 12.2653(7), 8.9485(6), 97.167(4), 101.840(3) , 87.893(5), V = 1303.48(14)Å^3, Z=4.

(**2**) $Na[MoO(O_2)_2C_5H_4NO(COO)].2H_2O$, SG P 2(1)/c, a,b,c,αβγ; 11.6753(2), 13.4514(3), 7.2919(2), 90.0, 93.602(2), 90.0, V = 1142.92(4)Å^3, Z=4.

4. Badania efektów strukturalnych i wpływu charakteru nośnika na aktywność katalizatorów miedziowych

(dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. dr hab. Małgorzata Witko, prof. dr hab. Mirosław Derewiński, dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, dr hab. Anna Micek-Ilnicka, dr Michał Śliwa, dr inż. Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, dr Łukasz Kuterasiński, dr Mariusz Gackowski, dr inż. Urszula Filek, dr Małgorzata Zimowska, mgr Jerzy Podobiński, mgr Natalia Ogrodowicz, mgr Joanna Kaim, mgr inż. Małgorzata Smoliło-Utrata)

Celem badań było poszukiwanie korelacji pomiędzy strukturą katalizatorów, których fazę aktywną stanowi miedź, a ich reaktywnością w reakcjach konwersji alkoholi. W roku 2021 skupiono się na dwóch rodzajach katalizatorów nośnikowych, 1) w których fazę Cu nanoszono na nośniki zeolitowe oraz 2) w których na TiO_2 naniesiono fazę miedziową oraz heteropolikwas $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW).

Ad 1) Jako nośnik fazy aktywnej użyto zeolitu Y o Si/Al = 2.5, zaś miedź wprowadzono metodami wymiany jonową oraz impregnacji mokrej. Właściwości utleniająco-redukujące badano technikami H_2 TPR oraz TPO, zaś specjację miedzi określono na podstawie pomiarów FT-IR z użyciem CO i NO jako cząsteczek-sond. Stwierdzono, że miedź na nośniku Y występuje jako Cu(I) w pozycjach S_{II}, S_{II*}, a jako Cu(II) w pozycjach S_{II}, S_{II*}, i S_{III}. Badania H_2 TPR oraz TPO wskazały, że redukowalność miedzi zależy od jej efektywnego ładunku, wynikającego z oddziaływania miedzi z nośnikiem (atomami tlenu zeolitu i/lub atomów tlenu z fazy tlenkowej Cu_xO). Im bardziej dodatnie kationy miedzi, tym łatwiej są redukowalne, im efektywny ładunek kationów miedzi niższy, tym łatwiej oddają one elektrony w procesie utleniania.

Ad 2) Jako nośnik fazy aktywnej użyto TiO_2 w formie P25 (hydrofilowy) i T805 (hydrofobowy), zaś miedź nanoszono stosując metodę mokrej impregnacji i metodę impregnacji kapilarnej, a następnie układ wygrzewano w 150 ºC (Cu@TiO_2(150)) i 400 ºC (Cu@TiO_2(400)). W drugim etapie, na tak przygotowane preparaty, metodą mokrej impregnacji nanoszono heteropolikwas $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW). Wykonano charakterystykę fizykochemiczną zsyntetyzowanych materiałów typu Cu@TiO_2@HPW obejmującą badania strukturalne XRD, SEM, EDS, XRF, FTIR, porowatość i rozwinięcie powierzchni (BET) oraz pomiary kwasowości katalizatorów techniką TPD NH_3. Analiza XRD wykazała obecność w próbkach Cu@TiO_2(150)@HPW soli miedziowej, podczas gdy w próbkach Cu@TiO_2(400)@HPW wykrystalizował CuO. W celu określenia stopnia utleniania miedzi w katalizatorach przeprowadzono badania spektroskopii absorpcji promieni rentgenowskich (XAS). Badania wykonano w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris na linii pomiarowej PEEM/XAS. Do detekcji sygnału użyto detektora PFY (ang. *partial fluorescence yield*), dającego sygnał od jonów miedzi znajdujących się w objętości próbki. Przeprowadzone badania wskazały, że powierzchnia katalizatorów zawierająca ok. 5% miedzi zawiera zarówno jony Cu(II) jak i jony Cu(I). Aktywność katalityczną próbek określono w reakcji dehydratacji n-butanolu w fazie gazowej w 120-220 ºC. W porównaniu z referencyjnymi katalizatorami (HPW@P25 i HPW@T805) wprowadzenie miedzi do układów HPW/TiO_2 powoduje wzrost selektywności w kierunku tworzenia butanalu i wzrost selektywności do trans 2-butenu kosztem cis-2-butenu. Zastosowanie w katalizatorach hydrofobowej mieszaniny anatazu i rutylu w postaci komercyjnego T805 jak i obecność miedzi w formie CuO (w układach Cu@TiO_2(400)@HPW kalcynowanych w 400 ºC) pozwoliła uzyskać materiały o wysokiej aktywności katalitycznej. Pomiary TPD NH_3 skorelowane z testami katalitycznym wykazały, że o aktywności katalizatorów miedziowych decydują centra kwasowych o średniej mocy. Podsumowując, wysoka aktywność katalizatorów miedziowych na TiO_2 spowodowana jest obecnością miedzi w formie tlenkowej, wysokim stężeniem centrów protonowych o średniej mocy i łatwą dostępnością reagenta do centrum aktywnego.

5. Nowe materiały katalityczne dla procesów „ zielonej chemii”

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr inż. Roman Dula, dr Dorota Duraczyńska, dr inż. Robert Karcz, dr Joanna Kryściak-Czerwenka, dr inż. Alicja Michalik, mgr inż. Bogna D. Napruszewska, dr hab. Katarzyna Pamin, mgr Anna Walczyk)

Zapotrzebowanie na efektywną waloryzację biomasy oraz sekwestrację CO_2 przyczyniło się do wzrostu zainteresowania zasadowymi katalizatorami i adsorbentami. Jako surowiec do opracowania nowego typu materiału o zasadowych właściwościach wybrano talk, naturalny krzemianowy minerał warstwowy zawierający magnez. Badania koncentrowały się na określeniu wpływu wstępnego mielenia minerału na efektywność aktywacji roztworem 2 M NaOH. Otrzymane materiały katalityczne scharakteryzowano następującymi metodami: XRD, SEM/EDX, adsorpcja/desorpcja N_2 w -196°C, AAS, FTIR oraz ^{29}Si MAS NMR. Zasadowość powierzchni określono przez miareczkowanie kwasem benzoesowym. Aktywność katalityczną testowano w reakcji kondensacji aldolowej acetonu.

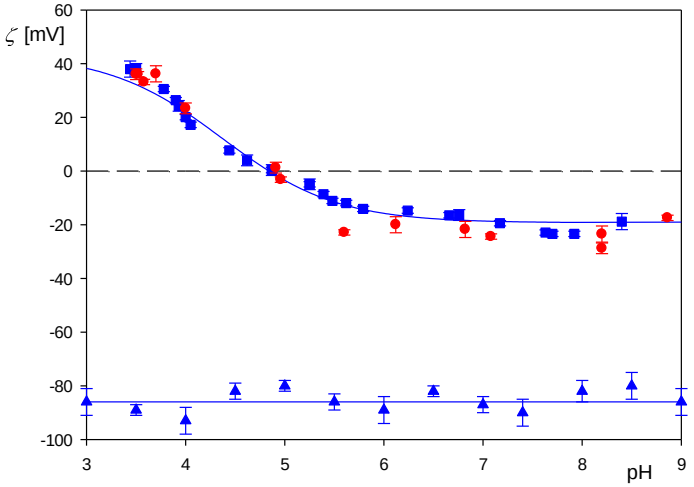
Uzyskane wyniki pokazały, że mielenie w połączeniu z aktywacją zasadową pozwala na efektywne kształtowanie powierzchniowych właściwości zasadowych katalizatorów na osnowie modyfikowanego talku, a co za tym idzie ich aktywności w reakcjach katalizy zasadowej. Mielenie powoduje destrukcję sieci krystalicznej talku poprzez depolimeryzację tetraedrycznych warstw krzemowych i utworzenie struktur typu kerolitu, czyli silnie nieuporządkowanej odmiany talku. Aktywacja NaOH narusza przede wszystkim podsieć krzemo-tlenową. Jej efekt jest nasilony w próbkach wstępnie mielonych, ponieważ zdepolimeryzowane fragmenty warstwy tetraedrycznej są szczególnie podatne na atak zasady. Alkalicznej aktywacji próbek mielonych towarzyszy wzrost stosunku Mg/Si, oraz tworzenie nowych faz: $Mg(OH)_2$ oraz słabo krystalicznych uwodnionych krzemianów (tzw. fazy MSH) o strukturach typu T-O i T-O-T. Fazy MSH są odpowiedzialne za wzrost powierzchni właściwej i odtworzenie płytkowej morfologii ziaren. Właściwości katalityczne próbek zależą silnie od sposobu aktywacji. Na zoptymalizowanym katalizatorze (mielonym przez 30 min i traktowanym zasadą przez 20 h w 90°C) wydajność kondensacji aldolowej jest 50x wyższa niż na próbce wyjściowego talku.

Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej

6. Mechanizmy i kinetyka immobilizacji białek na powierzchniach ciało stałe/elektrolit oraz określenie mechanizmu tworzenia koron białkowych na powierzchni nanocząstek dla układu mioglobina/lateks

(dr hab. Małgorzata Nattich-Rak, dr Marta Sadowska, dr Monika Wasilewska, dr Paulina Żeliszewska, prof. Zbigniew Adamczyk, dr hab. Magdalena Oćwieja)

Pomimo istotnego znaczenia min. dla stabilizacji cząsteczek koronawirusów, mechanizmy tworzenia korony białkowej na powierzchniach cząstkach koloidalnych, nie są poznane w dostatecznym stopniu. Dlatego, głównym celem przeprowadzonych badań był ilościowy opis adsorpcji cząsteczek mioglobiny na mikrocząstach polimerowych, co prowadzi do tworzenia korony, przy użyciu bezpośrednich metod eksperymentalnych oraz modelowania teoretycznego. Warto podkreślić, że mioglobina jest istotnym białkiem globularnym dostarczającym tlen do mięśni i regulującego procesy transportu tlenku azotu. Mioglobina jest również markerem uszkodzeń mięśnia sercowego oraz nerek. Adsorpcję cząsteczek mioglobiny na ujemnie mikrocząstkach polistyrenowych o ujemnym ładunku powierzchniowym badano przy użyciu dynamicznego rozpraszania światła (DLS), elektroforezy (LDV) oraz metody zubożenia roztworu z użyciem mikroskopii sił atomowych (AFM). Pomiary prowadzono przy pH 3,5 i sile jonowej NaCl 10^{-2} M oraz 0,15 M. Określono stabilność roztworów mioglobiny i zawiesin cząstek w funkcji pH. Następnie zbadano tworzenie korony cząsteczki mioglobiny za pomocą bezpośrednich pomiarów ruchliwości elektroforetycznej, które zostały przekształcone na potencjał zeta. Wyniki doświadczalne interpretowane ilościowo przy użyciu ogólnego modelu elektrokinetycznego, co umożliwiło określenie gęstości pokrycie korony w warunkach in situ. Maksymalne pokrycie osiągało 0,9 mg m^{-2} dla stężenia NaCl 0,01 M i 0,15 M i pH 3,5. Ponadto określono właściwości elektrokinetyczne korony (potencjał zeta) za pomocą pomiarów ruchliwości elektroforetycznej w szerokim zakresie pH (Rys. 1). Uzyskane wyniki potwierdziły, że dokładną pełna charakterystykę fizykochemiczną cząsteczek mioglobiny można uzyskać przy użyciu nM ilości białka. Argumentowano również, że rozwinięta metoda może być wykorzystana do przeprowadzenia charakterystyki elektrokinetycznej innych białek, np. białka S wirusa SARS-Cov-2 wykazujące, analogicznie do mioglobiny, ładunek dodatni dla pH < 5.



Rys. 1. Zależność potencjału zeta od pH uzyskana z pomiarów LDV dla 0,01 M, NaCl: ■, cząsteczki mioglobiny we wnętrzu roztworu, ● korona mioglobiny na cząstkach polimerowych (pokrycie 0,85 mg m^{-2}), ▲, cząstki polimerowe we wnętrzu. Linie ciągłe stanowią interpolacje danych eksperymentalnych.

7. Monowarstwy nanocząstek plazmonicznych o kontrolowanej strukturze oraz regulowanych właściwościach elektrokinetycznych

(dr hab. Magdalena Oćwieja, dr hab. Małgorzata Nattich-Rak, dr Julia Maciejewska-Prończuk, dr Marta Sadowska, dr Lilianna Szyk-Warszyńska, dr Monika Wasilewska, dr Paulina Żeliszewska, inż. Katarzyna Kusak, prof. Zbigniew Adamczyk)

Głównym celem podjętych prac badawczych było opracowanie efektywnych metod preparatyki mieszanych warstw nanocząstek złota i platyny o kontrolowanej strukturze, składzie oraz właściwościach elektrokinetycznych w oparciu o procesy sekwencyjnego osadzania nanocząstek z ich suspensji wodnych o zadanej sile jonowej oraz pH. Nanocząstki plazmoniczne zastosowane w badaniach otrzymano metodą wzrostu ziaren stosując cytrynian trisodu, jako czynnik kierunkujący wzrost i stabilizator. Wykazano, że kontrolując stosunek wagowy ziaren nukleacyjnych do prekursora metalu, stężenie cytrynianu trisodu oraz liczbę cyklów procesów redukcji można otrzymać stabilne nanocząstki złota i platyny o średniej wielkości od 3 do 150 nm. Za pomocą transmisyjnego mikroskopu elektronowego (TEM) wykazano, że nanocząstki charakteryzowały się quasi-kulistym kształtem oraz wąskim rozkładem wielkości (współczynniki polidyspersji PdI<0,25). Badania z użyciem techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS) wykazały, że nanocząstki zdyspergowane w roztworach wodnych wykazywały stabilność dla pH > 3,5 oraz siły jonowej < 0,03 M. Nanocząstki charakteryzowały się ujemnym potencjałem zeta rosnącym wraz ze wzrostem siły jonowej oraz spadkiem wartości pH.

Sterowany oddziaływaniami elektrostatycznymi proces osadzania nanocząstek plazmonicznych na powierzchniach miki i krzemu modyfikowanego poli(chlorowodorkiem alliloaminy) (PAH) przeprowadzono w warunkach transportu dyfuzyjnego i konwekcyjnego. Kinetyki osadzania nanocząstek i tworzenia monowarstw mono- oraz bimetalicznych wyznaczono za pomocą pomiarów grawimetrycznych stosując mikrowagę kwarcową (QCM) oraz obrazowanie za pomocą mikroskopu sił atomowych (AFM) i skaningowego mikroskopu elektronowego (SEM). Dla wszystkich typów nanocząstek plazmonicznych, niezależnie od ich wielkości oraz dla 5,5 < pH < 6,2, wykazano wzrost pokrycia maksymalnego monowarst monometalicznych wraz ze wzrostem siły jonowej. Maksymalne pokrycie monowarstw monometalicznych równe 30% otrzymano stosując siłę jonową 10^{-2} M.

Ponadto wykazano, że stosując sekwencyjne osadzanie nanocząstek plamonicznych z suspensji koloidalnych o wzrastającej sile jonowej można otrzymać stabilne monowarstwy bimetaliczne o kontrolowanym składzie, morfologii oraz pokryciu. Przeprowadzone badania dowiodły również, że stosując sekwencyjne osadzanie nanocząstek plazmonicznych o zróżnicowanych rozmiarach w warunkach kontrolowanej sił jonowej można otrzymać monowarstwy bimetaliczne o maksymalnych pokryciach wyższych od pokryć monowarstw monometalicznych otrzymywanych w tych samych warunkach pH i siły jonowej.

Nanocząstki plazmoniczne zdyspergowane w suspensjach wodnych oraz osadzone w postaci monowarstw zastosowano do detekcji erlotynibu będącego selektywnym inhibitorem kinazy EGFR stosowanym do miejscowego leczenia raka płuc i trzustki. Badania wykonano stosując powierzchniowo wzmocnioną spektroskopię Ramana (SERS) oraz powierzchniowo wzmocnioną odbiciową adsorpcję w podczerwieni (SEIRA). Na podstawie otrzymanych widm SERS stwierdzono, że pierścień aromatyczny fenyloacetylenu znajduje się w orientacji pionowej względem powierzchni nanocząstek złota. Grupa ta najsilniej wiąże się z podłożem za pośrednictwem wiązania C≡C. Stwierdzono również, że grupa fenyloacetylenowa nie bierze udziału w oddziaływaniu leku z powierzchnią nanocząstek platyny. Widoczne wzmocnienia pasm pochodzących od pierścienia aromatycznego w widmach SEIRA oraz wzrost ich intensywności wskazywały na bliskie położenie i prostopadłą orientację pierścienia względem powierzchni nanocząstek platyny. W ten sposób udowodniono, że monowarstwy bimetaliczne utworzone z nanocząstek plazmonicznych wykazują obiecujący potencjał aplikacyjny, jako nowoczesne substraty do badań spektroskopowych.

8. Właściwości fizykochemiczne i mechaniczne układów „bio”

(dr hab. Aneta Michna, dr Maria Morga, dr Agata Pomorska, mgr. Agnieszka Kurek, dr hab. inż. Jakub Barbasz, dr Piotr Batys, dr Leszek Krzemień, mgr. Dawid Lupa)

Celem zadania było zbadanie układów określanych jako „bio” w zakresie ich właściwości fizykochemicznych (takich jak ładunek, kształt i rozkład rozmiarów cząsteczek i cząstek w funkcji parametrów środowiska) oraz mechanicznych (takich jak moduły Younga, struktura przestrzenna upakowania).

Zadanie to było rozwinięciem zadania statutowego z roku 2020 poszerzonego o udział nowych osób, członków nowo powstałej grupy „układy w nano i mikroskali”

Kontynuując badania statutowe z roku 2020 pracowaliśmy nad modelem pomiarów wgłębień z mikroskopu sił atomowych metodą elementów skończonych. W tym zakresie opracowaliśmy nowy model komórki w oparciu o wypełnienie jej wnętrza przez płyn lepko sprężysty, będący lepszym przybliżeniem niż powszechnie stosowane modele nie uwzględniające dyssypacji energii w wyniku sił tarcia. Podobnie jak w roku poprzednim model uwzględniał złożoną strukturę komórki zwierzęcej, ale również pozwalał na modelowanie komórek roślinnych – to zostało opracowane w 2021 roku.

Zaproponowany model był równie łatwy w użyciu jak funkcja Hertza w celu wyodrębnienia właściwości komórki z pomiaru, z dodatkowym uwzględnieniem struktury wewnętrznej komórki.

Przygotowaliśmy w trakcie 2021 roku dwie publikacje w tej tematyce, jedna z nich jest obecnie rozpatrywana a druga przygotowywana do wysłania.

Pracowaliśmy również nad zachowaniem makro jonów w zależności od parametrów środowiska w jakim się one znajdują.

Wykonaliśmy również badania nad strukturą podłoża do osadzania białek oraz polielektrolitów (w tym DNA) uwzględniające parametry symulacyjne odwzorowujące rzeczywiste układy eksperymentalne a nie stechiometryczne wartości pochodzące z przybliżeń nie biorących pod uwagę niewielkiej objętości tzw. boksu symulacyjnego. Potwierdziliśmy wyniki symulacji eksperymentalnie i opracowywana jest obecnie praca podsumowująca uzyskane rezultaty.

W roku 2021 pracowaliśmy również nad wykorzystaniem modeli dyfuzji stosowanym w układach biologicznych do modelowania zjawisk makroskopowych. W zakresie tego poddziałania opublikowaliśmy pracę „Physics of free climbing” w uznanym czasopiśmie Phys Rev E (140 pkt. Ministerialnych).

9. Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni

(prof. dr hab. Nika Spiridis, prof. dr hab. Józef Korecki, dr hab. Jacek Gurgul, dr inż. Kinga Freindl, dr inż. Ewa Madej, dr Ewa Młyńczak, dr Piotr Mazalski, dr Robert Socha, dr inż. Dorota Wilgocka-Ślęzak, mgr Bohdana Blyzniuk, mgr Natalia Kwiatek)

Działalność statutowa grupy badawczej „Nanostruktury powierzchniowe" dotyczyła metalicznych i tlenkowych układów nanostrukturalnych, otrzymywanych głownie metodą epitaksji z wiązek molekularnych oraz ich właściwości chemicznych, strukturalnych, elektronowych, magnetycznych i funkcjonalnych.

Epitaksjalne warstwy Fe(001) wykorzystywane są w naszej grupie jako modelowy układ ferromagnetyczny, w którym stany studni kwantowej tworzone przez elektrony *d* są odpowiedzialne za wiele fundamentalnych zjawisk oscylujących z grubością warstwy, takich jak anizotropia magnetyczna czy też magnetoopór. Za pomocą mikroskopii pędu na bazie mikroskopii PEEM oraz pędowej i kątowo-rozdzielczej fotoemisji, zmapowaliśmy z niespotykaną dotąd precyzją skwantowane stany elektronowe Fe(001) w szerokim zakresie energii fotonów, począwszy od ultrafioletu próżniowego (8,4 eV) do miękkiego promieniowania rentgenowskiego (160 eV). Zinterpretowaliśmy stany elektronowe, które mogą być odpowiedzialne za oscylacje anizotropii magnetycznej o okresach około 5 i 9 monowarstw Fe(001). Zaobserwowaliśmy również zależne od magnetyzacji przerwy spin-orbita o symetrii niższej niż symetria objętościowa.

Przy pomocy planarnego efektu Halla w połączeniu z mikroskopią magnetooptyczną (MOKE) zbadaliśmy również przełączanie magnetyzacji indukowane prądem w płaszczyźnie w modelowych epitaksjalnych dwuwarstwach Au(001)/Fe(001) osadzanych na MgO(001). Pokazaliśmy powtarzalne elektryczne przełączanie namagnesowania pomiędzy wieloma stabilnymi stanami, które odpowiadały różnym konfiguracjom domen magnetycznych. Stwierdziliśmy, że fizyczny mechanizm indukowanego prądem przełączania magnetyzacji w układzie układu Au/Fe/MgO(001) w temperaturze pokojowej można w pełni wyjaśnić za pomocą pola Oersteda, które jest generowane przez prąd elektronowy przepływający głównie przez warstwę Au.

Za pomocą mikroskopii niskoenergetycznych elektronów (LEEM) monitorowaliśmy w czasie rzeczywistym iw skali mikrometrowej utlenianie żelaza na Pt(111). Zbadaliśmy rolę epitaksjalnej warstwy grafenowej w blokowaniu segregacji żelaza i tworzenia tlenków żelaza w warunkach utleniających. Innym rodzajem badanych nanostruktur węglowych były wielościenne nanorurki węglowe (MWCNT), zawierające nanocząsteczki żelaza. Zbadaliśmy wpływ funkcjonalizacji chemicznej i mechanicznej (mielenie) na właściwości magnetyczne.

Kontynuowaliśmy badania wpływu naświetlania jonami na właściwości magnetyczne epitaksjalnych warstw kobaltu umieszczonych pomiędzy warstwami metali ciężkich, Au i Pt. Do pomiaru anizotropii magnetycznej i siły oddziaływania Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) magnetometrię MOKE i spektrometrię Brillouina. Wyznaczona relacja między dawką jonów a właściwościami magnetycznymi może być wykorzystane do stosowania DMI nanourządzeniach magnonicznych.

Kilka zadań dotyczyło zastosowań badań XPS mających na celu określenie stanu chemicznego i stopnia utlenienia materiałów katalitycznych, takich jak dwutlenek tytanu domieszkowany cerem i żelazem, brązy molibdenowe i wolframowe na krzemionce i inne.

Ważnym zadaniem grupy jest udział w pracach dwóch linii badawczych w synchrotronie Solaris. W tym roku mikroskop PEEM został przeniesiony na undulatorową linię badawczą DEMETER. Mimo intensywnych prac eksperymentalnych realizowanych w fazie rozruchu wykonano kilka eksperymentów synchrotronowych PEEM i XAS, w tym m.in. szeroko zakrojone badania kompozytów termoelektrycznych (we współpracy z Bułgarską Akademią Nauk).

10. Cząsteczki o znaczeniu biologicznym w kontekście oddziaływania z powierzchnią oraz doskonalenia ich opisu teoretycznego

(prof. dr hab. Tomasz Pańczyk, prof. dr hab. Wojciech Płaziński, dr Agnieszka Brzyska, dr Paweł Wolski)

Przeprowadzone badania i ich wyniki obejmowały trzy problemy badawcze, dotyczące: (i) oddziaływania cząsteczek kwasu β-D-glukuronowego (GlcA), *N*-acetyl-β-D-glukozaminy (GlcNAc), ich dimerów oraz kwasu hialuronowego (HA) z powierzchnią jednościennych nanorurek węglowych (CNT); (ii) analizy mechanizmu oddziaływań GlcA oraz GlcNAc z powierzchnią nanorurek węglowych na poziomie kwantowochemicznym oraz (iii) badaniu oddziaływań cząsteczki zawierającej w swym szkielecie daunozaminę z powierzchnią węglowych kropek kwantowych (CQD).

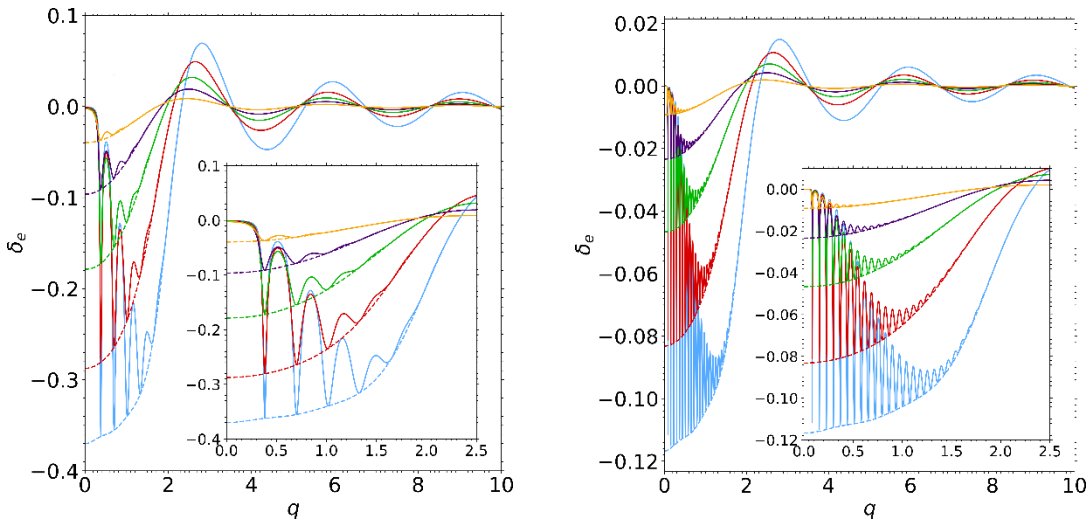
Adsorpcja hydrofilowych cząsteczek na powierzchni nanorurek węglowych to jedna z najczęściej stosowanych metod poprawy hydrofilowości i biodystrybucji z natury silnie hydrofobowych nanomateriałów węglowych. Badania adsorpcji cząsteczek GlcA, GlcNAc, ich dimerów oraz HA pokazały, że te cząsteczki mają zdolność do wiązania się z powierzchnią CNT, przy czym wykazują one istotne różnice jeśli chodzi geometrię oraz energetykę tego procesu. Badania oparte na symulacjach metodą klasycznej dynamiki molekularnej z użyciem pola siłowego GLYCAM/AMBER pokazały, że w grupie monomerów najsilniej wiąże się z powierzchnią CNT cząsteczka GlcNAc i, niezależnie od stopnia pokrycia powierzchni, zawsze adsorbuje się tą samą stroną w odniesieniu do powierzchni CNT. Tworzy ona też najbardziej jednolitą warstwę adsorpcyjną w zakresie dużych pokryć powierzchni. Cząsteczka GlcA wiąże się z powierzchnią CNT słabiej, choć również wykazuje preferencyjną orientację do powierzchni (odwrotną niż cząsteczka GlcNAc). Stwierdzono, że adsorpcja cząsteczki GlcA jest dodatkowo stabilizowana przez obecność bariery energetycznej (lub entropowej) w kierunku jej desorpcji. Dimery GlcA-GlcNAc oraz GlcNAc-GlcA wykazały większą tendencję do stabilnej adsorpcji na powierzchni CNT lecz jednocześnie do grupowania się w większe zespoły, tworząc lokalne wielowarstwy. Natomiast cząsteczka kwasu HA adsorbuje się tworząc strukturę helikalną i tylko w tym przypadku stwierdzono istotne deformacje wiązań glikozydowych. Obliczenia kwantowochemiczne potwierdziły zasadnicze wnioski dotyczące energetyki oraz geometrii cząsteczek GlcA oraz GlcNAc na powierzchni CNT uzyskane z zastosowaniem klasycznego pola siłowego. Uzyskano również istotne powierdzenie roli oddziaływań CH-π w ogólnym bilansie energetycznym wiązania tych monosacharydów z powierzchnia nanorurek węglowych.

Ważną cząsteczką zawierającą w swej strukturze aminosacharyd - daunozaminę - jest doxorubicyna (DOX) - znany lek antynowotworowy. Oddziaływanie DOX z powierzchnią węglowych kropek kwantowych jest istotne z punktu widzenia zastosowania CQD jako nośników leków. Opracowano model CQD zawierający na powierzchni różne grupy mogące ulegać protonacji/deprotonacji, w zależności od pH środowiska. Rdzeń CQD był modelowany z zastosowaniem potencjału wielociałowego zaś DOX oraz grupy funkcyjne z użyciem pola siłowego GAFF. Uzyskane wyniki wskazują, że oddziaływania elektrostatyczne wraz z wiązaniem wodorowym odgrywają główną rolę w procesach wiązania i uwalniania DOX. W obojętnym pH oddziaływanie CQD-DOX staje się silniejsze gdy liczba grup zawierających tlen na ściankach bocznych CQD wzrasta, podczas gdy w kwaśnym pH tendencja ta ulega odwróceniu. Obserwowane efekty przypisano korzystniejszej orientacji cząsteczki DOX na powierzchni CQD. Przy obojętnym pH, wraz ze wzrostem gęstości grup zawierających tlen, cząsteczki DOX wiążą się głównie na ściance bocznej CQD i bardziej selektywnie oddziałują z grupami funkcyjnymi nośnika poprzez ich polarne grupy funkcyjne, przez co skutkują silniejszymi oddziaływaniami elektrostatycznymi CQDs-DOX.

11. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych

(dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN, mgr Karolina Pałka)

Widmowa gęstość mocy (PSD) funkcji wysokości warstwy osadzonych cząstek jest ważną funkcją statystyczną pozwalającą na szybki i precyzyjny opis szorstkości tej warstwy. W dotychczasowych badaniach PSD monowarstw cząstek kulistych ograniczaliśmy się do stosunkowo dużych układów o symetrii kołowej i promieniu $R_s >> a$, gdzie a jest promieniem cząstek. Celem naszych ostatnich badań było teoretyczne wyznaczenie ilościowej zależności między promieniem analizowanego obszaru kołowego i błędem w obliczeniach PSD tego obszaru, wynikającym z zaniedbania ostatniego wyrazu w równaniu analitycznym tej funkcji. Badania objęły symulacje komputerowe adsorpcji monowarstw monodyspersyjnych cząstek kulistych o różnym pokryciu i promieniu obszaru adsorpcji, zgodnie z modelem przypadkowej adsorpcji sekwencyjnej. Dla każdego z układów wyznaczyliśmy dyskretną funkcję PSD. Obliczyliśmy też numerycznie wielkość poprawki reprezentowanej przez ostatni wyraz równania na PSD i błąd względny wynikający z zaniedbania tego wyrazu, jako funkcje liczby falowej q. Wyniki naszych obliczeń dla promienia $R_s = 10a$ oraz $R_s = 400a / 9$ przedstawia Rys. 1.



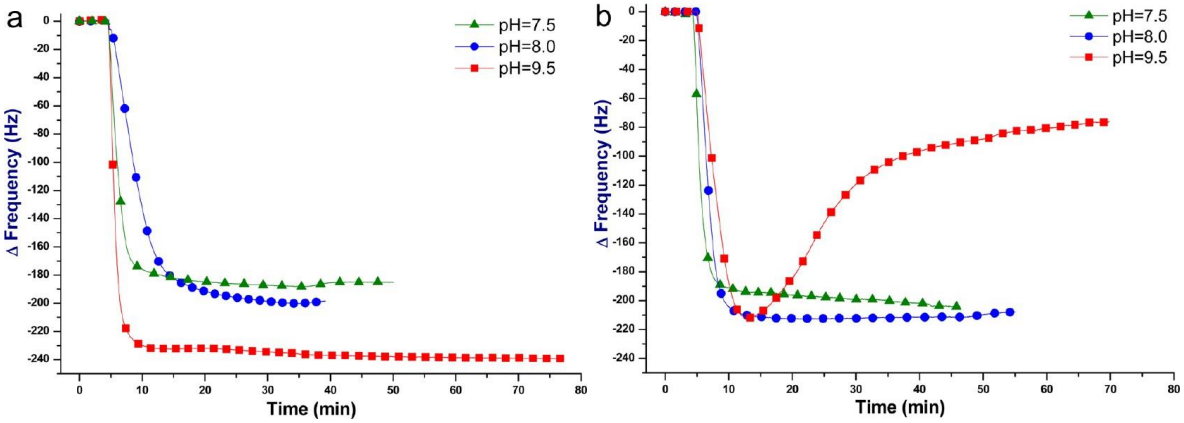
Rys. 1. Błąd względny wynikający z zaniedbania składowej PSD monowarstwy cząstek zależnej od wielkości analizowanego obszaru jako funkcja liczby falowej q. Lewy i prawy wykres przedstawiają, odpowiednio, wyniki obliczeń dla promienia obszaru $R_s = 10a$ oraz $R_s = 400a / 9$.

Otrzymane wyniki wskazują, że wyraz PSD zależny od wielkości analizowanego obszaru ma znaczący wpływ na PSD monowarstwy cząstek. Wpływ tego wyrazu maleje ze wzrostem promienia obszaru. Mimo występowania obserwowanej zależności wpływ wielkości obszaru na dopasowanie parametrów monowarstwy jest zaniedbywalny nawet w przypadku obszaru o promieniu $R_s = 10a$. Nasze badania sugerują, że większe znaczenie odgrywa deformacja cząstek na brzegu analizowanego obszaru.

12.Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

(prof. dr hab. Piotr Warszyński, dr hab. Marta Kolasińska-Sojka)

Możliwość przewidywania i kontroli osadzania dwuwarstw lipidowych na nośnikach nanostrukturalnych stanowi ważny aspekt w badaniach biomembran. Tworzenie dwuwarstw lipidowych poprzez adsorpcję i pękanie liposomów badano w odniesieniu do ich warunków osadzania oraz – filmu utworzonego z różnych polielektrolitów, użytego jako nośnik izolujący biwarstwę od powierzchni stałej. Liposomy wytworzono z zwitterjonowej 1-palmityn-2-oleilo-sn-glicero-3-fosfocholiny (POPC) oraz ujemnie naładowanej 1- palmityn-2- oleilo-sn-glicero-3-fosfoetanoloaminy (POPE) w buforze fosforanowym o różnych pH z dodatkiem lub bez NaCl. Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe (PEM) otrzymano poprzez sekwencyjną adsorpcję przeciwnie naładowanych polielektrolitów z ich roztworów – osadzanie warstwa po warstwie (LBL). Mechanizm powstawania dwuwarstwy lipidowej na nośniku PEM badano za pomocą mikrowagi kwarcowej z monitorowaniem dyssypacji (QCM-D) oraz mikroskopii sił atomowych (AFM). QCM-D umożliwił śledzenie kinetyki adsorpcji, a dzięki pomiarom AFM weryfikowano morfologię pęcherzyków lipidowych oraz osadzonych dwuwarstw lipidowych na filmach PEM. Dodatkowo wielowarstwy polielektrolitowe scharakteryzowano metodą elipsometrii w celu określenia ich grubości i pęcznienia. Wykazano, że wartość pH i dodatek NaCl w roztworze buforowym oraz rodzaj nośnika polielektrolitowego wpływały na kinetykę tworzenia i jakość powstających dwuwarstw lipidowych (Rys 1).



Rys 1. Zmiana częstotliwości kryształu QCM na skutek osadzania liposomów na filmie polielektrolitowym z roztworu buforu fosforanowego dla pH: 7,5; 8; 9,5 bez (a) oraz z dodatkiem (b) 0.15 M NaCl.

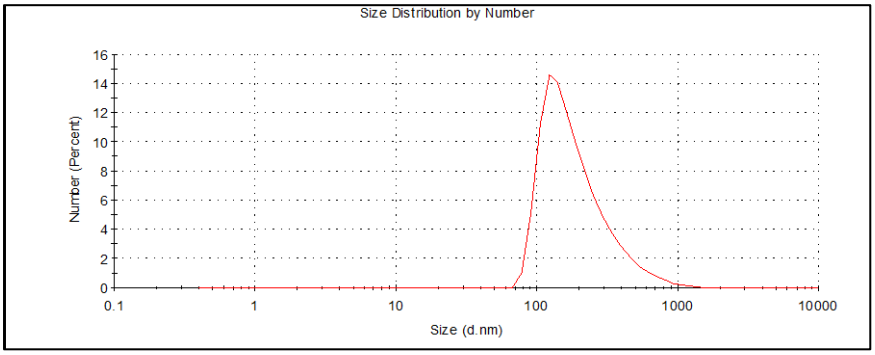
Udowodniliśmy wpływ pH i dodatku NaCl do roztworu buforowego PBS na tworzenie osadzonych biwarstw lipidowych POPC/POPE. Określiliśmy optymalne warunki pozwalające na swobodne pękanie liposomów, ich fuzję i tworzenie podwójnej warstwy lipidowej. Były to: pH = 9,5 oraz siła jonowa 0,15 M NaCl w buforze PBS. Odkryliśmy, że rodzaj nośnika polielektrolitowego odgrywał kluczową rolę w tworzeniu i jakości finalnej biwarstwy lipidowej. W zależności od nośnika, struktury lipidowe na powierzchni tworzyły jednorodnych dwuwarstw (jak dla filmu PEI(PGA/PLLpH=10)$_3$), dwuwarstw z frakcją nienaruszonych liposomów (osadzanie na monowarstwie PEI) oraz wysp dwuwarstw i wielowarstw lipidowych (dla PEI(PSS/PDADMAC)$_3$ and PEI(PSS/ PEI)$_3$).

13. Teranostyczne nanocząstki substancji przeciwnowotworowych

(dr hab. Krzysztof Szczepanowicz, prof. IKiFP PAN, dr Anna Pajor-Świerzy)

Pomimo ogromnego postępu w medycynie, wciąż wiele osób na świecie umiera z powodu braku skutecznych metod diagnozy oraz leczenia nowotworów. Zbyt późna diagnoza czy oporność wielolekowa komórek nowotworowych stanowi poważny problem kliniczny. Głównym problemem jest niska selektywność chemioterapeutyków, co głównie wynika z podania systemowego (ogólnoustrojowego) oraz ze słabej rozpuszczalności w środowisku wodnym (są to głównie substancje hydrofobowe). Zasadnym wydaje się zatem zastosowanie nośników leków przeciwnowotworowych, w celu poprawy biodystrybucji substancji terapeutycznych w ustroju, a tym samym, zwiększenia ich indeksu terapeutycznego. Nanotechnologia stwarza w tym zakresie nowe perspektywy, ponieważ umożliwia docelowy transport leków, a ponadto preparaty leków w postaci nano mogą charakteryzować się unikalnymi właściwościami nie tylko farmakokinetycznymi, ale także farmakodynamicznymi.

W 2021 roku skupiliśmy się na opracowaniu nowatorskiej metody wytwarzania nanonośników teranostycznych dla celowanych terapii przeciwnowotworowych. Wybrany lek przeciwnowotworowy (5-Fluorouracyl) enkapsulowano w wielowarstwowych nanonośnikach typu core@shell zbudowanych z poliaminokwasów poli(L-Lizyny) – PLL, oraz poli(kwasu glutaminowego) – PGA, oraz podstawionego pegiem-PGA – PGA-g-PEG. Nanonośniki tworzono metodą warstwa po warstwie, techniką saturacyjną. Rozmiar otrzymanych nanonośników 5-fluorouracylu mieścił się w zakresie 80-200 nm. Biokompatybilność naszych nanonośników oraz aktywność kapsułkowanego leku potwierdzono testami MTT. Ponadto, potwierdzono zdolność do obserwacji takich nośników w czasie rzeczywistym za pomocą obrazowania metodą magnetycznego rezonansu jądrowego (^{19}F-MRI).



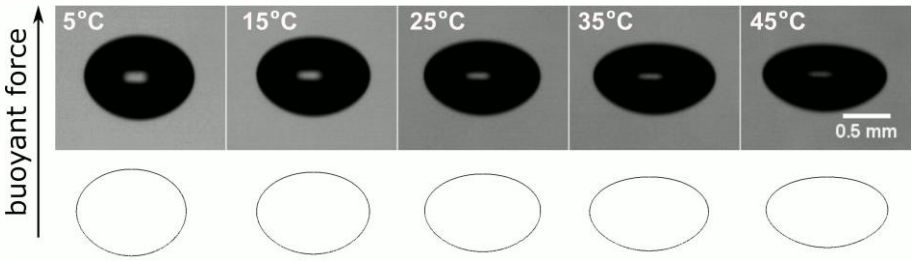
Rysunek 1. Rozkład wielkości nanonośników zawierających 5-Fluorouracyl.

14. Kinetyka wyciekania filmów ciekłych w warunkach dynamicznych – eksperyment i modelowanie teoretyczne

(dr hab. Jan Zawała prof. IKiFP PAN, mgr Mariusz Borkowski, dr Dominik Kosior, dr Georgi Gochev, mgr inż. Agata Wiertel-Pochopień, mgr inż. Dorota Gaweł)

Celem zadania było zbadanie stabilności pojedynczych filmów powstających w warunkach dynamicznych, tj. podczas zderzenia pojedynczych pęcherzyków gazowych ze stałymi i płynnymi powierzchniami międzyfazowymi. Dynamika tego zjawiska zależy w dużej mierze od parametrów ruchu pęcherzyka przed uderzeniem w powierzchnię i utworzeniem filmu. Parametry te są pochodną właściwości fizykochemicznych cieczy. W okresie sprawozdawczym zbadano wpływ tych właściwości na parametry ruchu pęcherzyka w wodzie oraz roztworze n-pentanolu o różnym stężeniu.

Parametry fizyczne cieczy modyfikowano poprzez zmianę jej temperatury w zakresie 5 – 45°C. W tym celu wykonano zestaw eksperymentalny złożony z kolumny z badaną cieczą umieszczanej w płaszczu wodnym, w którym cyrkulowała woda o określonej temperaturze. Prędkości pęcherzyków wyznaczano dwiema niezależnymi metodami: klasyczną metodą z użyciem kamery cyfrowej (wymagającej procedury analizy obrazów) oraz nowoopracowaną metodą pomiarów ultradźwiękowych. Ponadto, dla czystej wody przeprowadzono symulacje przy użyciu symulacji metodą obliczeniowej dynamiki płynów (CFD - Computational Fluid Dynamics) wykorzystując metodę objętości skończonych oraz algorytm VOF (Volume-of-Fluid) to śledzenia dynamicznych zmian powierzchni ciecz/gaz. Wykazano, że wartości prędkości pęcherzyka uzyskane obiema metodami eksperymentalnymi są tożsame, co wskazuje na to, że metoda ultradźwiękowa może być z powodzeniem używana w pomiarach zmian prędkości obiektów płynnych w cieczach. Wyniki obliczeń teoretycznych były zgodne z pomiarami. Ponadto dla czystej wody, wpływ właściwości fizycznych cieczy na ruch pęcherzyka przeanalizowano na podstawie wartości wyznaczonych liczb Reynolds'a (*Re*) i Weber'a (*We*), porównując wyznaczone trendy z danymi literaturowymi. Wykazano, że wraz ze wzrostem temperatury rośnie deformacja pęcherzyka, co bezpośrednio modyfikuje jego prędkość graniczną oraz wartości *We* i *Re*. Zdjęcia pęcherzyków uzyskane w eksperymencie oraz z modelowania przedstawiono na rys. 1. Analiza wartości współczynnika oporu wykazała, że różna prędkość oraz deformacja pęcherzyków spowodowana jest tylko i wyłącznie modyfikacją napięcia powierzchniowego (które maleje ze wzrostem temperatury) oraz lepkości i gęstości cieczy, nie powoduje natomiast zmiany natury hydrodynamicznych warunków na powierzchni ciecz/gaz - pozostaje ona całkowicie ruchliwa, niezalenie od temperatury. W przypadku roztworów n-pentanolu wykazano, że wzrost temperatury powoduje szybszą kinetykę tworzenia dynamicznej warstwy adsorpcyjnej oraz większy stopień unieruchomienia powierzchni ciecz/gaz, spowodowany wzrostem stopnia pokrycia pęcherzyka, który wynikał z szybszej dyfuzji cząsteczek substancji powierzchniowo-aktywnej do powierzchni międzyfazowej. Badania pozwoliły także wyprowadzić użyteczne równania empiryczne, wiążące parametry ruchu pęcherzyka z temperaturą cieczy w zakresie *Re* 200 -1000.



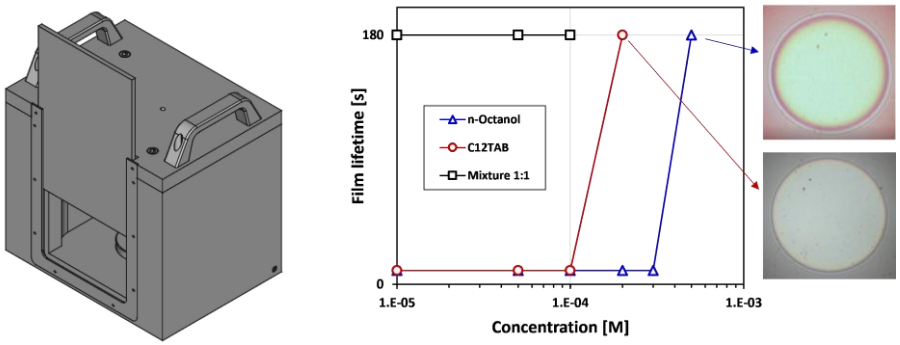
Rys. 1. Zdjęcia pęcherzyka unoszącego z prędkością graniczną w wodzie o różnych temperaturach. Poniżej, kontury pęcherzyka obliczone na podstawie symulacji w cieczach o różnych właściwościach fizycznych (lepkość, gęstość, lepkość), zmodyfikowanych przez zmianę temperatury.

15. Opracowanie układu eksperymentalnego do badania zjawisk powierzchniowych na ciekłych granicach faz w warunkach statycznych

(dr Georgi Gochev, prof. dr hab. Piotr Warszyński, dr Dominik Kosior, dr hab. Jan Zawała prof. IKiFP PAN)

Celem zadania było opracowanie i budowa układu eksperymentalnego do badań cienkich warstewek (filmów) ciekłych w celce Scheludko-Exerowa, który umożliwi badanie zjawisk powierzchniowych w warunkach statycznych. Opracowanie nowej metodologii pozwoli na badanie właściwości cienkich filmów ciekłych tworzących się pomiędzy pęcherzykami gazu, w odniesieniu do stabilności układów zdyspergowanych (głównie pian) powstających w roztworach tradycyjnych surfaktantów, polimerów i biopolimerów, białek oraz nanocząstek. Obserwacja oraz pomiary interferometryczne tworzących się filmów pianowych, przy stałym lub rosnącym przyłożonym ciśnieniu zewnętrznym, pozwolą na określenie wartości tzw. ciśnienia rozdzielającego (ang. disjoining pressure), które jest miarą specyficznych oddziaływań w cienkich warstwach. Ponadto, opracowany układ posłuży do uzyskania takich cennych informacji, jak: (i) rozmiar filmu, (ii) kinetyka wyciekania filmu do momentu osiągnięcia stanu równowagi oraz (iii) stabilność filmów w różnych warunkach fizykochemicznych.

W okresie sprawozdawczym zmodyfikowano będący na wyposażeniu Instytutu mikroskop, który został wzbogacony o zaprojektowaną i wykonaną we współpracy z firmą zewnętrzną komorę termostatowaną, kamerę oraz termostat. Do testów opracowywanej metodologii użyto zaprojektowanych i precyzyjnie wykonanych celek szklanych (typu Scheludko-Exerowa), w których, dzięki przyłożonemu ciśnieniu zewnętrznemu, powstawał cienki film pianowy (pomiędzy dwoma powierzchniami międzyfazowymi ciecz/gaz). Wstępne testy pozwoliły na obserwację cienkich filmów oraz na pomiary czasów ich wyciekania do tzw. krytycznej grubości pękania (czyli tzw. „czasów życia" film – ang. *film lifetimes*). Systematyczne badania wpływu stężenia n-oktanolu oraz bromku n-dodecylotrimetylo ammoniowego (C12TAB) oraz ich mieszanin (w stosunku 1:1) pozwoliły potwierdzić efekt synergistyczny, zaobserwowany wcześniej w warunkach dynamicznych, nie tylko dla filmów pianowych, ale także filmów zwilżających oraz rzeczywistych pian. Jak widać na rys. 1 minimalne stężenie, zapewniające dłuższy czas życia filmów utworzonych w jednoskładnikowych (czystych) roztworach badanych substancji (ok. 180 s) musiało być znacznie wyższe, w porównaniu ze stężeniem mieszaniny n-oktanol/C12TAB. W badanym zakresie stężeń różnica ta wynosiła rząd wielkości. Ponadto, analiza jakościowa zdjęć filmów uzyskanych dzięki kamerze mikroskopowej pozwoliła stwierdzić, że grubości pękających filmów różnią się od siebie, w zależności od rodzaju surfaktantu oraz składu roztworu, co wskazuje na odmienną kinetykę wyciekania filmów i ich różną stabilność. W kolejnym etapie układ eksperymentalny zostanie przystosowany do precyzyjnych pomiarów grubości filmów ciekłych (pomiary interferometryczne).



Rys. 1. Schemat termostatowanej komory do pomiarów kinetyki wyciekania ciekłych filmów w warunkach statycznych (po lewej) oraz zmierzone wartości „czasów życia" filmów pianowych w roztworach oktanolu, C12TAB i ich mieszaninach (po prawej).

16. Hydrożelowe mikrokapsułki z nanostrukturalnymi powłokami

(prof. dr hab. Piotr Warszyński, dr Lilianna Szyk-Warszyńska, dr Ewelina Jarek, dr Tomasz Kruk)

W ramach zadania w 2021 roku przeprowadzono badania mikrocząstek hydrożeli alginianowych i karboksymetylocelulozowych tworzonych metodą jonowego żelowania jako ewentualnych nośników związków biologicznie czynnych. Zrozumienie czynników kontrolujących profile uwalniania związków biologicznie czynnych przez nośniki biopolimerowe jest niezbędne do określenia ich zastosowania jako systemów dostarczania leków. Podjęliśmy próbę oceny zależności między kinetyką uwalniania wybranych fitofarmaceutyków z mikrocząstek hydrożeli a właściwościami fizykochemicznymi otrzymanych makro- i mikronośników. W celu opóźnienia uwalniania związków z mikrokapsułek hydrożolowych, były one zamykane metodą naprzemiennej adsorpcji w powłokach polielektrolitowych (PE) utworzonych z chitosanu, żelatyny, poli(chlorowodoreku aliloaminy), soli sodowej poli(4-styrenosulfonianu) oraz nanocząstek tlenków żelaza. Skuteczne osadzanie PE zostało potwierdzone metodą FTIR, a ich grubość i lepkość scharakteryzowano za pomocą technik QCM-D i elipsometrycznych.

Kulki hydrożelu o rozmiarach od 612 do 1080 μm zostały z powodzeniem załadowane eskuliną, która jest organicznym związkiem naturalnie występującym np. w kasztanowcu, wykazującym niebieską fluorescencję pod wpływem światła o długości 360 nm. Eskulina rozpuszcza się w środowisku zasadowym >pH7. Skuteczność enkapsulacji eskuliny, stosowanej jako modelowy fitofarmaceutyk, jak wykazały badania UV-Vis, wyniosła ponad 57%. Morfologia mikrocząstek hydrożelowych została określona za pomocą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM) a wydajność enkapsulacji określono metodą spektrofotometrii. Nośniki hydrożelowe wykazywały przedłużone uwalnianie ładunku (~90–300 min) w warunkach wodnych o pH7, w zależności od rodzaju powłoki. SEM i mikroskopia fluorescencyjna ujawniły wielkość mikrometryczną, w większości kulisty kształt oraz topografię badanych mikrokapsułek. Fizyczną stabilność mikrokapsułek w mediach o różnych wartościach pH potwierdzono badaniami CLSM i grawimetrycznymi. Uwalnianie ładunku monitorowano in situ za pomocą CLSM w zmiennych warunkach pH. Sposób uwalniania ładunku z naszych cząstek został dobrze opisany za pomocą modeli matematycznych Korsmeyera-Peppasa i Peppasa-Sahlina, a także nowo zaproponowanego modelu hybrydowego. Dodatkowo, model Gallaghera-Corrigana został wybrany jako odpowiedni do przewidywania uwolnienia ładunku w zmiennych warunkach od przejścia z roztworu o pH2 do pH7. Stworzenie najbardziej pożądanego modelu matematycznego dla przewidywania profili uwalniania ułatwiło nam określenie mechanizmu i kinetyki uwalniania związków aktywnie czynnych z badanych hydrożelowych nośników.

17. Nowe materiały katodowe do wysokotemperaturowych ogniw paliwowych o obniżonej temperaturze pracy

(dr hab. Michał Mosiałek, dr Dmitry S. Kharitonov, dr inż. Grzegorz Mordarski, dr Małgorzata Zimowska)

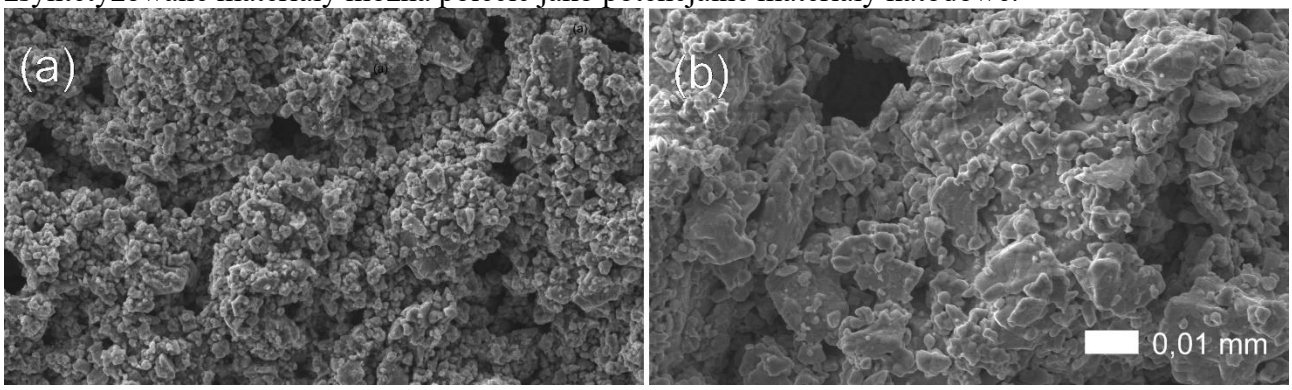
Tlenki mieszane $NdBaCoCuO_{5+\delta}$ (NBCC1), $NdBaCuFe_{0,5}Co_{0,5}O_{5+\delta}$ (NBFCC), $NdBaCo_{1,5}Cu_{0,5}O_{5+\delta}$ (NBCC2) i $NdBaFeCoO_{5+\delta}$ (NBFC) otrzymane na drodze syntezy w ciele stałym zostały zbadane jako potencjalne materiały katodowe dla wysokotemperaturowych ogniw paliwowych (WOP) z elektrolitem ze stałego tlenku. Jako elektrolity zastosowano gęste gazoszczelne spieki o kształcie cylindra z $Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_{1,9}$ (SDC) o średnicy 20 mm i wysokości 1 mm przecięte na pół. Proszki utarto z nośnikiem organicznym w moździerzu agatowym otrzymując pasty, które naniesiono sitodrukiem na powierzchnię SDC, a następnie spiekano otrzymując elektrody. Po spiekaniu zbadano morfologię powierzchni i przekroju katod za pomocą skaningowego mikroskopu elektronowego JEOL JSM-7500F. Badania elektrochemiczne przeprowadzono przy użyciu potentiostat/galwanostat/ZRA Gamry serii 300 w mieszaninach tlenu i argonu w kolejno zmieniających się ciśnieniach parcjalnych tlenu, przyłożonych potencjałach i temperaturach. Widma elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej (ESI) dopasowano programem MINUIT z zastosowaniem kompleksowej regresji nieliniowej.

Otrzymane materiały krystalizują w symetrii P4/mmm. Wyniki pokazują, że wszystkie przygotowane materiały są chemicznie i termicznie kompatybilne z elektrolitem SDC. Najniższe współczynnika rozszerzalności liniowej (17,4 i 17,7 × 10^{-6} K^{-1}) zaobserwowano odpowiednio dla materiałów NBFCC i NBCC2. Materiały te posiadały również najwyższą przewodność elektryczną.

Przygotowane elektrody wykazywały w badaniach skaningowej mikroskopii elektronowej porowate jednorodne mikrostruktury o różnej morfologii powierzchni (rys. 1). Wielkość ziaren malała wraz ze spadkiem zawartości żelaza w badanym materiale katodowym.

Pomiary ESI w mieszaninie gazowej zawierającej 20% obj. tlenu w kolejno zmieniających się temperaturach od 800 do 500 °C w krokach co 25 °C pozwoliły na obliczenie energii aktywacji odwrotności oporu polaryzacyjnego dla elektrod NBCC1, NBFCC, NBCC2 i NBFC, które wynoszą odpowiednio 1,26, 1,76, 1,41 i 1,31 eV. Analiza badań elektrochemicznych prowadzonych w mieszaninach tlen-argon zsyntetyzowanych materiałów wykazała, że średnie rzędy reakcji redukcji tlenu (RRT) w temperaturze 800 °C w zakresie ciśnienia parcjalnego tlenu od 0,02 do 1 (dla NBFCC 0,01–1) wynoszą odpowiednio 0,17, 0,20, 0,26 i 0,26 dla NBCC1, NBFCC, NBCC2 i NBFC. Natomiast w 700 °C przyjmują wartości odpowiednio 0,09, 0,14, 0,30 i 0,19 dla NBCC1, NBFCC, NBCC2 i NBFC.

Materiał katodowy NBCC1 wykazał wysoką przewodność elektryczną w połączeniu z wystarczającą zawartością wakancji tlenowych i najniższymi wartościami oporu polaryzacyjnego w testach ESI. Dlatego wyróżniliśmy ten materiał jako najskuteczniejszy w katalizie RRT. Wszystkie zsyntetyzowane materiały można polecić jako potencjalne materiały katodowe.



Rys. 1. Mikrostruktura elektrod NBCC1 (a), NFCC2 (b) – widok z góry.

18. Badania właściwości fizykochemicznych funkcjonalnych nanonośników na bazie dendrymerów oraz białek

(*prof. Barbara Jachimska*)

Celem zadania była weryfikacja efektywności działania układu dendrymerów PAMAM jako nośników leków onkologicznych. Badania prowadzono dla kompleksów dendrymerów poli (amidoaminy) (PAMAM) z 5- fluorouracylem (5FU) oraz doxorubicyną (DOX), leków stosowanych w leczeniu nowotworów przewodu pokarmowego czy raka piersi.

Efektywność immobilizacji leku w strukturze dendrymeru monitorowano z zastosowaniem dynamicznego rozpraszania światła (DLS), zeta potencjału oraz spektroskopii UV-Vis, SAXS, NMR, FTIR. Metody spektroskopowe potwierdziły stabilność otrzymanego kompleksu. Testy uwalniania wskazały kluczową rolę warunków środowiskowych (pH, siła jonowa) na kinetykę uwalniali leku ze struktury nośnika. Testy aktywności kompleksów wobec pięciu linii komórkowych: czerniaka złośliwego (A375), raka jajnika (MDAH), glejaka (SNB-19), raka prostaty (Du-145) i gruczolakoraka okrężnicy (HT-29) wykazały wzrost efektywności leku poprzez immobilizację w strukturze dendrymeru oraz poprawność działania układu nawet do 7 dni po zastosowaniu.

Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

19. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki środowiska w ich otoczeniu

(mgr inż. Magdalena Soboń, dr Marcin Strojecki, dr Arkadiusz Janas, prof. dr. hab. Łukasz Bratasz)

W ramach zadania badawczego prowadzono prace nad dalszym rozwojem oprogramowania do ilościowej oceny fizycznego zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania klimatyczne – HERIe. W planie rozwoju platformy jest m.in. wzbogacenie bazy typów obiektów zabytkowych, uwzględniającej do tej pory obrazy na desce, uwięzione elementy drewniane i pergamin, o nowe przykłady obiektów, wchodzących w skład zbiorów muzealnych, jak również zwiększenie granicznych wartości temperatury i wilgotności względnej (RH), dla których można prowadzić obliczenia, by odzwierciedlić warunki panujące w muzeach w innych strefach klimatycznych.

Wprowadzenie wspomnianych modyfikacji wymagało rozważenia stosowalności zasady superpozycji – podstawy dotychczasowego działania HERIe – do opisu zmian parametru decydującego o zagrożeniu pod wpływem wahań klimatu dla każdego z problemów badawczych. W przypadku obrazów na desce i uwięzionych elementów drewnianych parametrem tym jest odpowiedź wymiarowa obiektu. Zasada superpozycji pozwala na dokonanie transformacji Fouriera na danych klimatycznych i otrzymanie szeregu funkcji okresowych, dla których obliczone odpowiedzi mogą zostać zebrane i przy pomocy transformaty zostać złożone w rzeczywistą odpowiedź obiektu. Zasadę superpozycji można zastosować wyłącznie, gdy zmiana parametru decydującego o zagrożeniu zależy liniowo od zmian RH.

Jednym z nowych typów obiektów zabytkowych poddawanych analizie są masywne obiekty drewniane. W badaniach nad rozwojem pęknięć w tego typu przedmiotach przyjęto szybkość uwalniania energii, G, za parametr determinujący ryzyko uszkodzenia obiektu kultury – drewnianej rzeźby. Wartość krytyczna dla materiału, G_{Ic}, jest kryterium zagrożenia, którego przekroczenie powoduje przyrost głębokości pęknięcia w rzeźbie. Na podstawie przeprowadzonych symulacji numerycznych wykazano, że dla każdej dyskretnej początkowej głębokości pęknięcia maksymalne osiągane G wzrasta wraz z amplitudą spadku RH w sposób nieliniowy.

W przypadku obrazów na desce utrata liniowej zależności odpowiedzi wymiarowej obiektu na wahania RH jest charakterystyczna dla warstwy podobrazia w obrazach na desce, tzw. gesso, pod wpływem wysokiej temperatury i w wysokich wilgotnościach, co determinuje odkształcenie obiektu we wspomnianych warunkach.

Po przeprowadzonej analizie uznano, że jedynym rozwiązaniem pozwalającym na ominiecie istniejącego problemu i tym samym umożliwienie użytkownikom takim jak konserwatorzy, kustosze i właściciele obiektów zabytkowych szacowanie ryzyka dla zbiorów jest zbudowanie narzędzia do pełnej symulacji numerycznej metodą elementów skończonych. Obecnie, kontynuowane są analizy z dostarczycielem oprogramowania COMSOL Multiphysics w celu wyboru formy licencji pozwalającej na rozwój platformy HERIe w tym kierunku.

W ramach zadania przygotowano także manuskrypt publikacji prezentujący wyniki symulacji numerycznych wielkości G osiąganej dla masywnego obiektu z drewna sosnowego w warunkach dynamicznych zmian klimatu „Risk of fracture in massive wooden cultural heritage objects due to dynamic environmental variations” (obecnie w recenzji).

Grant Rozwojowy

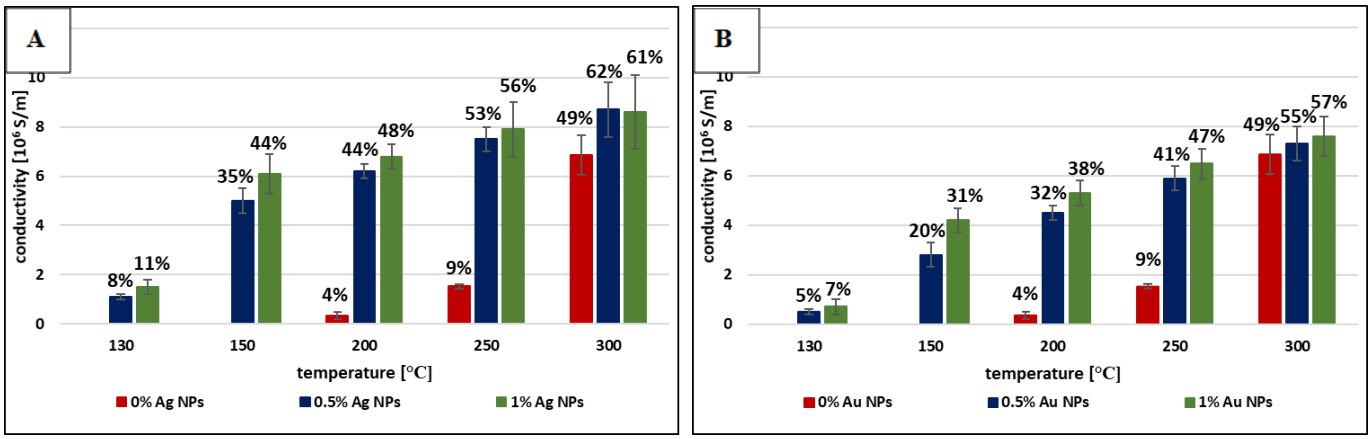
20. Zastosowanie nanomateriałów do wytwarzania warstw przewodzących na stykach elektroenergetycznych

(dr Anna Pajor-Świerzy)

Projekt Rozwojowy IKiFP PAN nr 1/GR/2019 [2020-2022]

W związku z największą przewodnością elektryczną oraz termiczną, najczęściej stosowanym materiałem do wytwarzania powłok chroniących styki elektroenergetyczne jest srebro. Jednakże jego wadą jest wysoki współczynnik tarcia oraz znaczna plastyczność, dlatego powłoki na bazie srebra łatwo ulegają uszkodzeniom oraz odkształceniom, które prowadzą do ubytków w warstwie oraz korozji podłoża. Zjawiska te przyczyniają się do destrukcji styków, czego konsekwencją jest podwyższenie ich rezystancji a co za tym idzie temperatury pracy, co znacznie ogranicza czas ich eksploatacji. W związku z tym, głównym celem badań w ramach projektu rozwojowego było opracowanie nowych materiałów tj. tuszów lub past, których głównym komponentem będą nanocząstki metaliczne o strukturze rdzeń-powłoka („core-shell") np. nikiel-srebro, oraz ich wykorzystanie do otrzymywania powłok chroniących styki elektroenergetyczne.

W trakcie badań przeprowadzonych w roku 2021 zoptymalizowano proces otrzymywania przewodzących powłok na bazie nanocząstek metalicznych nikiel-srebro w celu wzmocnienia ich właściwości przewodzących i/lub obniżenia ich temperatury spiekania. Zbadano wpływ dopowania, dotychczas wykorzystywanych past na bazie nanocząstek „core-shell" nikiel-srebro, nanocząstkami metali szlachetnych takimi jak srebro lub złoto. Zarówno wpływ stężenia nanocząstek metali szlachetnych (srebra i złota) jak i temperatury spiekania na właściwości przewodzące otrzymanych powłok został zanalizowany. Otrzymane wyniki, przedstawione na Rys. 1, wskazują, iż dodatek obu rodzajów nanocząstek wpływa na polepszenie właściwości przewodzących powłok w porównaniu do warstw zawierających tylko nanocząstki nikiel-srebro. Wartości przewodnictwa dla tego typu warstw wzrastają wraz ze wzrostem temperatury spiekania. Jednakże, najbardziej obiecujące wyniki uzyskano dla powłok dopowanych nanocząstkami srebra o stężeniu 0.5%. Biorąc pod uwagę względy ekonomiczne najlepsze wartości przewodnictwa (44% w stosunku do czystego niklu) otrzymano po procesie spiekania powłok w temperaturze 200°C, natomiast warstwy o najwyższych wartościach przewodnictwa (61%) otrzymano po procesie spiekania w 300°C.



Rys. 1. Wpływ temperatury oraz stężenia nanocząsteczek srebra (A) i złota (B) na właściwości przewodzące powłok na bazie nanocząstek nikiel-srebro o strukturze core-shell.

21. Zeolity o strukturze fojazytu jako modyfikatory ANFO

(dr inż. Łukasz Kuterasiński)

Projekt Rozwojowy IKiFP PAN nr 2/GR/2020 [2021-2023]

Materiały wybuchowe znajdują obecnie szerokie zastosowanie zarówno w przemyśle wojskowym jak również w pracach cywilnych m.in. górnictwie, robotach wyburzeniowych czy makroniwelacjach. Jednym z najczęściej wykorzystywanych materiałów wybuchowych (zwłaszcza w górnictwie) jest ANFO (Ammonium Nitrate Fuel Oil). Tłumaczone to jest stosunkowo łatwą oraz tanią metodą produkcji ANFO jak również jego dobrymi właściwościami strzałowymi.

ANFO uzyskiwane jest poprzez zmieszanie azotanu(V) amonu (AN) (składnik tlenonośny) z olejem napędowym (FO) (składnik palny) w odpowiednim stosunku masowym (przeważnie 94.5:5.5). Stosunek 94.5:5.5 (AN:FO) zapewnia uzyskanie tzw. zerowego bilansu tlenowego czyli braku nadmiaru lub niedomiaru tlenu w bilansie składu materiału wybuchowego, co odpowiada za uzyskanie maksymalnej energii detonacji przy zachowaniu niskiej toksyczności gazów postrzałowych (minimalna zawartość NO_x oraz CO).

Jak dotąd, w dostępnej literaturze dotyczącej ANFO udokumentowano jedynie wyniki badań odnoszących się do właściwości fizykochemicznych układów, w których składnikiem tlenonośnym był azotan (V) amonu a modyfikatorami pyły metaliczne i niemetaliczne oraz sole nieorganiczne. Nie opublikowano wpływu dodatków pełniących funkcję nośnika modyfikatorów nieorganicznych. Przykładem tego typu dodatków mogłyby być zeolity ze względu na obecność m. in. krzemu i glinu w strukturach zeolitowych jak i ze względu na możliwość wprowadzenia szerokiej gamy innych pierwiastków do tej grupy materiałów.

W zaproponowanych badaniach, wybrano zeolit o strukturze fojazytu (FAU) ze względu na jego niski moduł krzemowy ($2<Si/Al<5$). Oznacza to, że zeolit o tej strukturze zawiera dużo glinu i w związku z tym charakteryzuje się on wysoką zdolnością jonowymienną w porównaniu do zdecydowanej większości zeolitów o innych strukturach. Wysoka zawartość glinu i wprowadzonych metali do fojazytu pozwala na zastosowanie tego materiału jako reprezentatywnego nośnika modyfikatorów nieorganicznych ANFO. W planowanych badaniach wstępnych, wprowadzanym metalem do zeolitu będzie magnez ze względu na korzystny wpływ tego pierwiastka na właściwości detonacyjne ANFO, co opublikowane zostało w jednej z naszych poprzednich prac. Właściwości fizykochemiczne materiałów wybuchowych typu ANFO z dodatkami zeolitowymi porównane zostały z materiałem ANFO bez dodatku zeolitowego (będącym próbką odniesienia).

Analiza wyników badań dyfrakcji fal rentgenowskich (XRD) oraz spektroskopii w podczerwieni wykazały brak zmian w strukturze ANFO na skutek dodatku zeolitu Y (zarówno z jak i bez magnezu). Z kolei, dodatek zeolitu Y wpłynął lekko na właściwości termiczne otrzymanego w ten sposób materiału wybuchowego typu ANFO.

Znacznie bardziej interesujące wyniki otrzymano pod kątem badan morfologii oraz statusu powierzchni zewnętrznej badanych próbek ANFO. Na podstawie zdjęć otrzymanych z badań z zastosowaniem Skaningowej Mikroskopii Elektronowej (SEM) wykazano, że modyfikacja ANFO zeolitem Y spowodowała pojawienie się licznych ziaren o nieregularnych kształtach, o rozmiarach nieprzekraczających 1 μm. Podobne obserwacje miały miejsce w przypadku analizy wyników badań przeprowadzonych z zastosowaniem Mikroskopii Sił Atomowych (AFM), gdzie stwierdzono obecność krystalitów zeolitowych o nieregularnych kształtach. Ponadto, wprowadzenie zeolitu Y do azotanu amonu spowodowało spadek pofałdowania powierzchni badanych próbek ANFO.

Analiza pierwszych wyników badań testów strzałowych oraz symulacji właściwości detonacyjnych wskazuje, że dodatek zeolitu Y (zarówno z magnezem jak i bez) ma korzystny wpływ na właściwości detonacyjne otrzymanych w ten sposób materiałów wybuchowych typu ANFO. Siła eksplozji, ciepło wybuchu oraz prędkość detonacji wzrosły.

Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”

1. Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu w biosyntezie alkaloidów o aktywności farmakologicznej - struktury, mechanizmy reakcji i racjonalne przeprojektowywanie enzymów

Projekt badawczy „SONATA BIS" NCN 2014/14/E/NZ1/00053 [2015-2021]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Tomasz Borowski)

W ramach tego projektu, zakończonego formalnie w maju 2021, realizujemy ściśle powiązane ze sobą badania strukturalne, biochemiczne oraz obliczeniowe nad dwiema grupami dioksygenaz zależnych od 2-oksoglutaranu (ODD) uczestniczących w biosyntezie alkaloidów o szerokim zastosowaniu w farmakologii. Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury tych białek oraz szczegółowych mechanizmów ich reakcji katalitycznych.

Kontynuowano próby krystalizacji skróconej wersji jednego z białek z substratami. Po wielu próbach udało się znaleźć warunki ko-krystalizacji enzymu z dwoma alkaloidami – substratami tego enzymu. Zebrano dane dyfrakcyjne na wiązce synchrotronowej PETRA III i rozwiązano struktury krystaliczne metodą podstawienia cząsteczkowego. Udokładnione struktury ujawniły, że w przypadku jednego z alkaloidów substrat jest związany w konformacji niekatalitycznej, natomiast drugi alkaloid wiąże się z enzymem w sposób umożliwiający zajście reakcji.

Kontynuowano również badania doświadczalne nad wariantami jednego z białek, którego zmiany miały na celu jego upodobnienie do drugiego enzymu. Białka te wyprodukowano i oczyszczono oraz poddano testom na aktywność katalityczną.

W ramach prac obliczeniowych dokonano syntezy wyników uzyskanych w trakcie realizacji tego projektu oraz innych dostępnych w literaturze i dotyczących specyficzności reakcji katalizowanych przez ODD. Zebrane wyniki opublikowano w pracy przeglądowej.

2. Pole siłowe mechaniki molekularnej dla badania struktury, dynamiki oraz konformacji węglowodanów zawierających jednostki furanozowe

Projekt badawczy „SONATA BIS" NCN 2015/18/E/ST4/00234 [2016-2021]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Wojciech Płaziński)

Oddziaływanie cyklodekstryn z wybranymi lekami

Finalny etap realizacji projektu został poświęcony na badanie oddziaływań leku (aksetyl cefuroksymu) z szeregiem niefunkcjonalizowanych lub alkilowanych cyklodekstryn. W szeregu symulacji dynamiki molekularnej zbadano struktury kompleksów typu lek-cyklodekstryna, opisano mechanizm tworzenia takiego kompleksu oraz (za pomocą symulacji typu *enhanced-sampling*) oszacowano powinowactwo badanych cyklodekstryn do cząsteczki leku. Wygenerowane dane strukturalne użyte zostały do obliczenia teoretycznych widm IR oraz interpretacji danych eksperymentalnych.

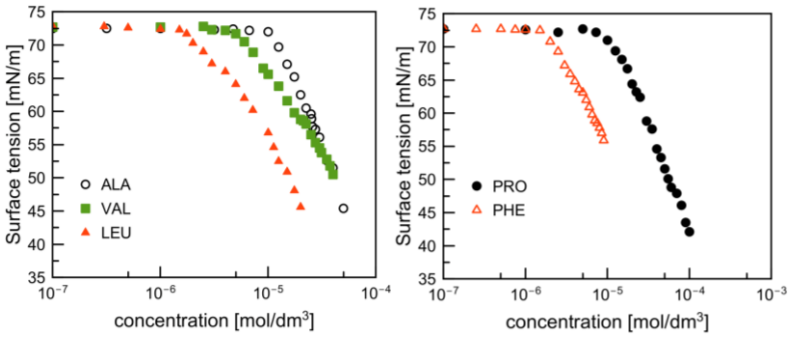
Ponadto, opracowano rozdział mający stanowić część monografii naukowej poświęconej fruktanom, tj. polisacharydom zbudowanych z jednostek fruktofuranozy. Do jego przygotowania wykorzystano m.in. dane uzyskane podczas wcześniejszych etapów realizacji projektu.

3. Synergistyczne efekty mieszanych roztworów bit-surfaktantów w stabilności filmów ciekłych w warunkach dynamicznych- badania podstawowe o potencjale aplikacyjnym we flotacyjnym procesie separacji

Projekt badawczy „SONATA BIS" NCN 2020/38/E/ST8/00173 [2021-2025]
(kierownik projektu: dr hab. Jan Zawała, prof. IKiFP)

Celem projektu są badania o charakterze podstawowym, majce na celu wyjaśnienie powodu i warunków istnienia efektów synergistycznych wybranych mieszanych odczynników flotacyjnych, które mogą występować podczas tworzenia i wyciekania filmów ciekłych powstających w warunkach dynamicznych, a więc mogą mieć wpływ na stabilność filmów. Do badań na zjawiskiem synergii wybrano surfaktanty będące pochodnymi aminokwasów, których roztwory zawierają dodatek prostego surfaktantu niejonowego.

W okresie sprawozdawczym wykonano badania mające na celu charakterystykę właściwości adsorpcyjnych wybranych surfaktantów z aminokwasową grupą hydrofilową oraz łańcuchem dwunastowęglowym (amino acid surfactats – AASs). Do badań wybrano surfaktanty otrzymane przez połączenie łańcucha C12 z alaniną (C12-ALA), waliną (C12-VAL), leucyną (C12-LEU), proliną (C12-PRO) oraz fenyloalaniną (C12-PHE). Charakterystyka właściwości adsorpcyjnych otrzymanych surfaktantów polegała na wyznaczeniu wartości pKa substancji oraz wykonanie systematycznych pomiarów dynamicznych oraz równowagowych napięć powierzchniowych (σ), w celu wyznaczenia tzw. izoterm. Wartości σ przedstawiono na rys. 1 Na podstawie badań wykazano, że badane surfaktanty w roztworach wodnych zachowują się jak słabe kwasy, a ich pKa oscyluje w granicach 4.5 - 5.5, w zależności od rodzaju grupy aminokwasowej. Ponadto stwierdzono, że aktywność powierzchniowa surfaktantów koreluje ze stopniem hydrofobowości ich części polarnej (aminokwasowej) i może być ustawiona w następującym szeregu: C12-PRO < C12-ALA < C12-VAL < C12-LEU < C12-PHE. Jednocześnie wykazano, że aktywność powierz-chniowa badanych surfaktantów jest znacznie większa niż aktywności typowych surfaktantów kationowych o podobnej długości łańcucha węglowego. Teoretyczny opis procesu adsorpcji, wykonany na podstawie obliczeń teoretycznych (w tym z użyciem symulacji metodą dynamiki molekularnej) pozwolił na wyznaczenie takich ważnych parametrów jak m. in.: aktywności powierzchniowej surfaktantów, maksymalnego pokrycia monowarstwy, parametru opisującego oddziaływania części niepolarnych zaadsorbowanych surfaktantów oraz efektywnego promienia, powierzchni i objętości van der Waals'a grup hydrofilowych. Wykazano, że badane surfaktanty mogą stanowić bardzo dobrą alternatywę dla surfaktantów syntetycznych, ponieważ wykazują porównywalną zdolność do obniżania wartości napięcia powierzchniowego w porównaniu z surfaktantami niejonowymi. Ponadto, z uwagi na fakt możliwości hydrolizy wiązania amidowego utworzonych surfaktantów C12-aminokwas, zarówno w środowisku kwaśnym jak i zasadowym, można uznać je za substancje biodegradowalne.



Rys. 1. Wartości napięcia powierzchniowego w funkcji stężenia roztworu badanych AASs.

Projekty badawcze NCN „Sonata”

1. Wpływ struktury krystalograficznej ZrO_2 na aktywność katalizatorów Cu/ZrO_2 i Cu/ZrO_2-ZnO domieszkowanych Ga, Mn i Ni w reakcji niskotemperaturowego reformingu parowego bio-etanolu

Projekt badawczy „SONATA" NCN 2016/23/D/ST4/02492 [2017-2021]
(kierownik grantu: dr Michał Śliwa)

Katalizatory typy mieszanych tlenków miedziowo-cyrkonowych (Cu/Zr), miedziowo-cyrkonowo-cynkowych (Cu/Zr/Zn) dotowanych tlenkiem niklu oraz wzorzec CuO zostały przebadane w reakcje rozkładu etanolu (EtOH) z detekcją w podczerwieni (FTIR) oraz metodą temperaturowo programowanej desorpcji etanolu (EtOH-TPD) przy zastosowaniu spektrometru masowego jako detektora.

Na podstawie otrzymanych wyników stwierdzono, że zaadsorbowany etanolu na CuO ulega utlenieniu to aldehydy z wytworzeniem wody. Dodatkowo w reakcji tej nie powstaje wodór. W przypadku natomiast katalizatora Cu/Zr powstanie aldehydu octowego wynika zarówno z reakcji utlenienia jak i odwodornienia, o czym świadczy pojawienia się wodór w produktach reakcji rozkładu etanolu. Powyżej temperatury 588 K aldehyd octowy jest dalej utleniany do kwasu octowego, a w powyżej temperatury 583 K powstaje aceton. Podwyższenie dalsze temperatury prowadzi do utlenienia cząsteczek organicznych do CO i CO_2. Dodatek natomiast ZnO skutkuje obniżeniem temperatury, w której powstaje aceton, a dodatek NiO prowadzi do reakcji rozkładu aldehyd octowego do CH_4 i CO.

Przeprowadzono także badania DFT odziaływania cząsteczki etanolu (EtOH) z klastrem miedzi Cu7 o symetrii D5h oraz na wybranych modelach Cu7/m-ZrO_2 z wykorzystaniem oprogramowania Turbomol. Pierwszym etapem badań było zoptymalizowanie struktury addutków Cu7-EtOH i obliczenie energii adsorpcji etanolu. Obliczenia pokazały, że najbardziej stabilnym adduktem jest zawsze układ z cząsteczką etanolu związaną przez atom O do jednego z atomów Cu w płaszczyźnie pierścienia pięciokątnego. Obliczenia DFT dotyczące konwersji etanolu na kompleksie Cu7-EtOH wykazały cztery możliwe ścieżki reakcji: dwie prowadzące do odwodornienia EtOH do aldehydu octowego i dwie prowadzone do odwodnienia etanolu do etenu. Spośród nich najniższą barierą energetyczną odznaczała się ścieżka odwodornienia, w której atom H z grupy hydroksylowej przyłączony był do atomu Cu tworzącego wierzchołek piramidy pięciokątnej.

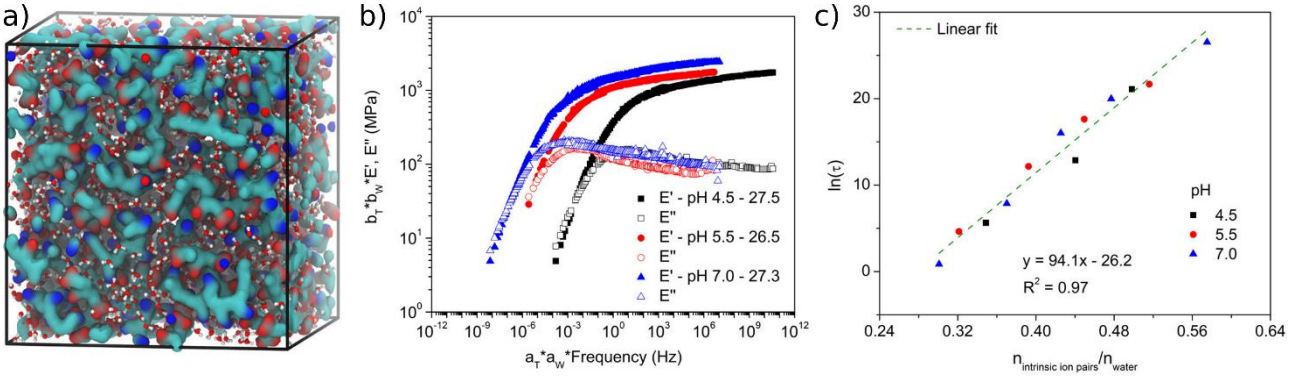
Pomiary katalityczne przeprowadzone na układach Cu/Zr i Cu/Zr/Zn potwierdziły, iż dominującym produktem węglowym reakcji jest aldehyd octowy. Na tej podstawie stwierdzono, że wodór na katalizatorach miedziowych powstaje głównie w wyniku odwodornienia etanolu. Pojawienie się aldehydu octowego związane jest z kolei z zasadowością powierzchni układów Cu/Zr i Cu/Zr/Zn, która, jak pokazały badania CO_2-TPD, jest wysoka. W przypadku natomiast wszystkich katalizatorów miedziowych nie zaobserwowano powstawania etenu, co świadczy o niskiej kwasowości otrzymanych preparatów i jest zgodne z obliczeniami DFT.

2. Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów

Projekt badawczy "SONATA" NCN 2018/31/D/ST5/01866 [2019-2022]
(kierownik projektu: dr inż. Piotr Batys)

W celu lepszego zrozumienia procesów kompleksowania polipeptydów na poziomie molekularnym oraz wpływu pH na ten proces przeprowadzono obszerne obliczenia teoretyczne kompleksowania poli-L-lizyny (PLL) i kwasu poliglutaminowego (PGA) metodą dynamiki molekularnej (MD) dla różnych stopniach jonizacji molekuł. Przeanalizowano zmiany w wiązaniach wodorowych, konformacji, ładunku efektywnym oraz strukturze drugorzędowej w funkcji pH. Wyniki sugerują, że struktura drugorzędowa powstałego kompleksu zmienia się w czasie kompleksowania i zależy od pH. Dodatkowo wykazano, że pH determinuje liczbę par jonowych skompensowanych wewnętrznie, utworzonych między polielektrolitami. Wyniki zostały zweryfikowane eksperymentalnie za pomocą pomiarów potencjału zeta oraz dichroizmu kołowego.

Zbadano również wpływ pH dla kompleksów wytworzonych z modelowych słabych polielektrolitów, poli(chlorowodorku alliloaminy) (PAH) i poli(kwasu akrylowego) (PAA). W szczególności pokazano, jak na właściwości termiczne i mechaniczne wpływa pH kompleksowania. Obszerną charakterystykę eksperymentalną, uzyskaną dzięki dynamicznej analizie mechanicznej, różnicowej kalorymetrii skaningowej, spektroskopii w podczerwieni z transformacją Fouriera i spektroskopii protonowego jądrowego rezonansu magnetycznego, uzupełniono symulacjami MD w rozdzielczości atomowej. Wyniki sugerują, że czasy relaksacji (τ) kompleksów polielektrolitowych przy różnych zawartościach wody i wartościach pH układają się na jednej linii (rys. 1), zgodnie z zależnością: $\ln(\tau) \sim n_i/n_w$, gdzie n_i oraz n_w oznaczają odpowiednio liczbę wewnętrznie skompensowanych par jonowych i cząsteczek wody. Wynik ten podkreśla rolę wody znajdującej się wokół wewnętrznie skompensowanych par jonowych w relaksacji uwodnionych kompleksów polielektrolitów. Zastosowanie superpozycji czasu, temperatury, wody i pH wykazało, że pH w jakim następuje kompleksowanie wpływa na właściwości materiału, ale nie zmienia mechanizmu relaksacji.



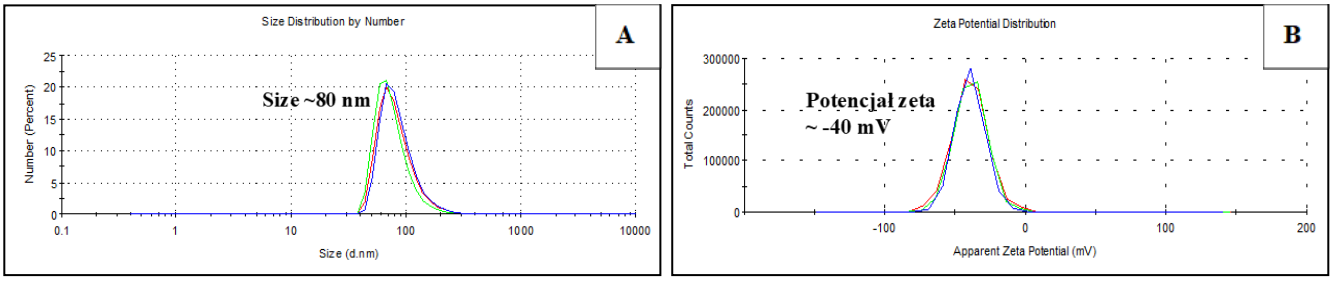
Rys. 1. (a) Reprezentatywne zdjęcie kompleksu PAH/PAA zawierające 31,7% wag. wody w 20 °C, uzyskane z symulacji MD. Atomy węgla polielektrolitów są zaznaczone na niebiesko, podczas gdy atomy tlenu i azotu są zaznaczone odpowiednio na czerwono i niebiesko. (b) Dane z dynamicznej analizy mechanicznej kompleksów PAH/PAA otrzymanych w pH 4,5, 5,5 i 7,0. (c) Logarytm naturalny czasu relaksacji w funkcji stosunku liczby wewnętrznie skompensowanych par jonowych do cząsteczek wody, dla kompleksów PAH/PAA otrzymanych w pH 4,5, 5,5 i 7,0.

3. Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali

Projekt badawczy "SONATA" NCN 2020/39/D/ST5/01937 [2021-2024]
(kierownik projektu: dr Anna Pajor-Świerzy)

Elektronika drukowana przy użyciu nanomateriałów otwiera nowe możliwości dla przemysłu elektronicznego. Dotychczas, w związku z największą przewodnością elektryczną oraz termiczną, najczęściej stosowanym materiałem do wytwarzania przewodzących ścieżek i obwodów elektronicznych było srebro. Jednakże jego wadą jest wysoka cena oraz podatność na uszkodzenia mechaniczne. W związku z tym poszukiwane są alternatywne materiały. W tym kontekście, jako zamienniki nanocząstek srebra (Ag NPs), mogą być wykorzystywane nanocząstki miedzi, cyny i niklu. Wiąże się to z ich niższą ceną, lepszymi właściwościami mechanicznymi oraz wysoką przewodnością elektryczną. Jednakże ich wadą jest tendencja do procesu utleniania w warunkach atmosferycznych. Stabilność takich metalicznych nanocząstek (Cu, Ni, Sn) odnośnie procesu utleniania można osiągnąć poprzez utworzenie na ich powierzchni cienkiej powłoki ochronnej („shell") z metali szlachetnych (Ag lub Au), czego wynikiem jest powstanie cząstek bimetalicznych o strukturze typu „rdzeń-powłoka" („core-shell"). W związku z tym, głównym celem projektu „Sonata" jest rozwinięcie metod syntezy różnego rodzaju nanocząstek bimetalicznych typu „core-shell", zoptymalizowanie ich właściwości fizykochemicznych (rozmiar, kształt, stabilność odnośnie procesu utleniania i agregacji), a następnie ich wykorzystanie do procesu otrzymywania przewodzących tuszów i past do wytwarzania drukowanych ścieżek przewodzących.

W trakcie badań przeprowadzonych w roku 2021 opracowano metodę syntezy nanocząstek miedzi, jako rdzenia nanocząstek o strukturze „core-shell". Nanocząstki o optymalnych właściwościach otrzymano w wyniku redukcji jonów Cu za pomocą borowodorku sodu jako czynnika redukującego, w obecności kwasu glikolowego, pełniącego funkcję czynnika kompleksującego oraz polimeru (PSS, sulfonianu polistyrenu) jako stabilizatora, zapewniającego ochronę nanocząstek przed procesem agregacji i sedymentacji. Otrzymane nanocząstki charakteryzowały się rozmiarem około 80 nm i potencjałem zeta około –40 mV, co przedstawiono odpowiednio na Rys. 1A, B. Nanocząstki te wykazują obiecujące właściwości (rozmiar, stabilność odnośnie procesu agragacji) do ich wykorzystania w kolejnym etapie syntezy nanocząstek „core-shell", t.j. wytwarzania ochronnej otoczki tzw. („shell"). Otrzymane nanocząstki miedzi wykazują duży potencjał jako główny komponent tuszów lub past do wytwarzania przewodzących powłok lub ścieżek przy wykorzystaniu różnych metod drukowania (druk sitowy, natryskowy lub strumieniowy).



Rys. 1. Rozkład wielkości (A) oraz potencjału zeta (B) nanocząstek miedzi otrzymanych w optymalnych warunkach syntezy.

Projekty badawcze NCN „Opus”

1. Magnetyczne nanocząstki na periodycznych matrycach tlenków żelaza: stabilizacja magnetyzmu i jego kontrola zewnętrznym polem elektrycznym

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2016/21/B/ST3/00861 [2017-2021]
(*kierownik projektu: prof. dr hab. Nika Spiridis)*

W centrum badań objętych projektem znajdowały się epitaksjalne warstwy i heterostruktury metal ferromagnetyczny/tlenek, będące punktem wyjścia dla układów o potencjalnych zastosowaniach spintronicznych, a wśród nich epitaksjalne tlenki żelaza o specyficznej strukturze atomowej, elektronowej i magnetycznej, czyli magnetytu (Fe_3O_4) o orientacji (111) oraz hematytu (α-Fe_2O_3) o orientacji (0001), które charakteryzuje występowanie periodycznych modulacji struktury powierzchniowej, nazywanych w literaturze nadstrukturami bifazy.

W ostatnim roku realizacji projektu (2 miesiące) podsumowano przeprowadzone badania naukowe i stwierdzono, że do najważniejszych osiągnięć projektu należy:

1. Otrzymywanie powtarzalnych i jednorodnych nadstruktur bifazy na powierzchni magnetytu Fe_3O_4(111) i wyjaśnienie ich struktury w skali atomowej w oparciu o wysokorozdzielcze obrazy STM oraz właściwości adsorpcyjne.
2. Precyzyjna kontrola i periodyczności, rozmiarów i gęstości samoorganizujących się nanocząstek metali (w szczególności Au, Fe i Co), na powierzchniach bi-Fe_3O_4(111).
3. Sterowanie rozkładami bimetalicznych nanocząstek Au-Fe na monokrystalicznym podłożu rutylu TiO_2(110)
4. Modelowanie odwracalnych procesów utleniania i redukcji magnetyt-hematyt w epitaksjalnych cienkowarstwowych układach na Pt(111).
5. Opracowanie technologii epitaksjalnych tlenków żelaza bezpośrednio na podłożach tlenkowych, MgO(001) i MgO(111), lub z wykorzystaniem metalicznej warstwy buforowej Pt.
6. Zbadanie elektronowej i magnetycznej struktury warstw granicznych w epitaksjalnych układach Co/magnetyt i Co/hematyt.
7. Charakteryzacja właściwości magnetycznych sztucznego tlenkowego ferromagnetyka o stechiometrii FeO stabilizowanego na Pt(111)
8. Stabilizacja prostopadłej anizotropii w modelowym złączu TMR na bazie trójwarstw Fe/MgO/Fe_3O_4(001)
9. Elektryczne przełączanie antyferromagnetycznego wektora Néela w epitaksjalnych warstwach hematytu w kontakcie z platyną za pomocą spinowo-orbitalnego momentu siły (SOT)

2. Opracowanie nowoczesnej technologii wytwarzania stabilnych biologicznych filmów powierzchniowych o właściwościach drobnoustrojobójczych i leczniczych

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2016/21/B/ST8/02107 [2017-2022]
(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

Celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania i nanoszenia stabilnych cienkich filmów powierzchniowych zbudowanych na bazie mieszanin hypoalergicznych, nietoksycznych biopolimerów, głównie tzw. zielonych surfaktantów. Naukowym celem projektu jest zbadanie procesów konkurencyjnej adsorpcji zachodzących w roztworach wieloskładnikowych, których głównymi substratami są różne aktywne powierzchniowo lub biologiczne biopolimery. W trakcie projektu chcemy zbadać, które z możliwych do otrzymania formulacji biopolimerów mają wystarczającą aktywność powierzchniową, aby w przyszłości mieć zastosowanie w produktach kosmetycznych. Chcemy wyznaczyć opisane wyżej minimalne niezbędne do przeprowadzenia zwilżenia lub wytworzenia efektu powierzchniowego stężenia surfaktantów. Opracowane warstwy powierzchniowe zostaną również zbadane pod względem bakteriostatyczności cytotoksyczności. W celu osiągnięcia tego celu w ciągu 2021 roku prowadzono w projekcie prace badawcze związane z dwoma obszarami tematycznymi projektu.

Zbadano właściwości powierzchniowe syntetycznego surfaktantu, występującego pod nazwami arginian etylowo-lauroilowy, LEA lub Miranet. LAE to kationowy środek powierzchniowo czynny na bazie aminokwasów o niskiej toksyczności i działaniu przeciwdrobnoustrojowym. Jest szeroko stosowany jako konserwant żywności i komponent do pakowania żywności. Podczas przechowywania LAE rozkłada się poprzez hydrolizę na składniki powierzchniowo czynne Na-lauroilo-l-argininę (LAS) lub kwas dodekanowy (laurynowy). Przeanalizowaliśmy izotermę napięcia powierzchniowego LAE o czystości analitycznej w stosunku do LAE po dłuższym przechowywaniu. Wykorzystaliśmy obliczenia kwantowej teorii funkcjonału gęstości mechanicznej (DFT) w celu określenia preferowanej ścieżki hydrolizy i omówienia możliwości tworzenia wysoce powierzchniowo czynnych heterodimerów, anionu dodekanianowego LAE lub LAE-LAS. Stosując symulacje dynamiki molekularnej, określiliśmy stabilność dimerów połączonych oddziaływaniami elektrostatycznymi i wiązaniami wodorowymi. Wykorzystaliśmy model adsorpcji mieszanin surfaktantów, aby z powodzeniem opisać eksperymentalne izotermy napięcia powierzchniowego. Rzeczywisty moduł dylatacyjny powierzchni części określony metodą oscylacji kropli jest zgodny z mechanizmem transportu dyfuzyjnego. Jednak nieliniową odpowiedź napięcia powierzchniowego można było zaobserwować dla stężenia LAE bliskiego i wyższego od krytycznego stężenia micelarnego (CMC). Nieliniowość wynika z obecności miceli i reorganizacji warstwy międzyfazowej.

Ponadto opracowano stałe filmy powierzchniowe oparte na zasobach naturalnych — skrobi ziemniaczanej, chitosanu, kwasu hylauronowego zawierające dodatki grafenu, cząstek stałych lub wygenerowanych kropek kwantowych siarczku cynku i siarczku kadmu. Dzięki swoim unikalnym właściwościom, wynikającym z obecności nanocząstek, opracowane filmy mogą być wykorzystywane do opracowywania zaawansowanych czujników i biosensorów, np. do różnych szkodliwych substancji, metali ciężkich, rozwoju mikroorganizmów, zmian środowiskowych w produktach spożywczych.

W 2021 roku zaprezentowano jeden poster online związany z wykonanymi w projekcie pracami na konferencji PTChem 2021. Opracowane wyniki opublikowano w czterech publikacjach ISI/JCR wydanych w 2021 roku. W związku z ograniczeniami związanymi z pandemią projekt został przedłużony do stycznia 2022 roku. Po ponad 4 latach projektu, w projekcie opublikowano 12 publikacji ISI/JCR, w pierwszej połowie 2022 roku złożone zostaną jeszcze 3 publikacje.

3. Mechanizm regioselektywnego utleniającego odwodornienia 3-ketosteroidów przez dehydrogenazę Δ^1-cholest-4-en-3-onu ze *Sterolibacterium denitrificans*

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2016/21/B/ST4/03798 [2017-2021]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec)

Celem projektu jest przebadanie mechanizmu reakcji odwodornienia steroidów katalizowanej przez FAD-zależną dehydrogenazę Δ^1-cholest-4-en-3-onu (AcmB) ze *S. denitrificans*. Enzym katalizuje utleniające odwodornienie 3-ketosteroidów skutkujące wprowadzeniem wiązania podwójnego pomiędzy atomami węgla C1-C2 w pierścieniu A steroidów. Projekt zakłada poznanie struktury oraz właściwości katalitycznych i opis możliwej ścieżki reakcji metodami teoretycznymi.

W czasie ostatnich 6 miesięcy projektu badania skupiły się na konsolidacji prac obliczeniowych i kinetycznych dotyczących opisu mechanizmu dehydrogenacji steroidów prowadzonych przez enzymy z klasy KSTD. W szczególności dokonano pełnego opracowania kinetyki przedstacjonarnej dla KSTD1 i AcmB uzyskując wartości stałych kinetycznych wiązania i rozpadu kompleksu enzym substrat oraz etapu chemicznego dla 17-metylotestosteronu oraz wykazano brak optimum pH dla reakcji połówkowej redukcji AcmB przez substrat. Kolejne badania kinetyczne metodą stopped flow dla AcmB wykazały, że stała szybkości redukcji kofaktora flawinowego jest wyższa niż 500 s^{-1} co w zestawieniu z wynikami aktywności względem pH potwierdziło, że o obserwowanym w stanie stacjonarnym optimum pH decyduje etap reutleniania enzymu. Bardzo szybka kinetyka redukcji uniemożliwiła jednak wyznaczenie stałych kinetycznych tego etapu czy pomiar kinetycznego efektu izotopowego dla szybkości redukcji FAD. Wyznaczono jednak KIE metodą konkurencyjną uzyskując odpowiednio dla pH 6,5 i 8,0 wartości 1,21 i 1,28 dla substratu podstawionego przy C2, oraz 1,5 i 1,23, dla substratu podstawionego przy C1.

Uzyskane wyniki kinetyczne powiązano z modelowaniem. Przeprowadzone modelowanie metodą QM:MM MD wykazało, że AcmB katalizuje reakcje zachodzącą wg proponowanego w literaturze dwustopniowego unimolekularnego mechanizm eliminacji sprzężonego z zasadą (E1cB), nawet dla niższego pH. Wyniki te pozostają w zgodzie z kinetycznymi pomiarami w stanie przedstacjonarnym redukcji FAD w funkcji pH (brak optimum w pH < 7.0). Na podstawie tego samego modelu uzyskano również profile energetyczne dla przebadanych eksperymentalnie mutacji. Wyniki te dostarczają informacji na temat roli poszczególnych wiązań wodorowych w stabilizacji kolejnych stadiów reakcji. Wysokości barier uzyskane z metod obliczeniowych układają się w podobny trend jak zmierzona eksperymentalnie aktywność zmutowanych wersji AcmB. Jedyny model odstający od wyników eksperymentalnych odpowiada mutacji Y536F, dla niego też obserwowano największe odstępstwa w geometrii w porównaniu do oryginalnej struktury enzymu. Na koniec należy zaznaczyć, że dokończono udokładnianie struktury AcmB i wykazano, że dodatkowa „pętla" w pobliżu wejścia do centrum aktywnego wyróżniająca podklasę enzymów KSTD do której należy AcmB, ma w rzeczywistości strukturę helisy.

Uzyskane wyniki opublikowano w dwóch publikacjach, które ukazały się w ACS Catalysis i Microbial Cell Factories zaś udokładnioną strukturę krystalograficzną AcmB zdeponowano w bazie PDB (kod . 7P18)

4. Teoretyczne i doświadczalne badania mechanizmu reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów katalizowanej przez hierarchiczne materiały zeolitowe zawierające wanad

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2016/23/B/ST4/02854 [2017-2021]
(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

Celem prowadzonych w ramach niniejszego projektu prac doświadczalnych i teoretycznych jest zbadanie natury wanadowych centrów aktywnych, odpowiedzialnych za aktywność katalityczną w utleniającym odwodornieniu (ODH – oxidative dehydrogenation) lekkich alkanów do alkenów oraz określenie mechanizmu procesu ODH zachodzącego na katalizatorach na osnowie zeolitów hierarchicznych zawierających wanad.

Kontynuowano testy katalizatorów wanadowych, różniących się typem zeolitu (BEA, FAU i ich formy hierarchizowane) oraz zawartością wanadu (1-7 %mas.) w reakcji ODH etanu. Testy były prowadzone w gazowym reaktorze przepływowym ze złożem stałym, połączonym z chromatografem gazowym w celu detekcji substratów oraz produktów reakcji w zakresie temperatur od 400°C do 500°C oraz z różnym czasem kontaktu. Określono szereg aktywności badanych układów w reakcji ODH etanu (w 500 °C):

- dla katalizatorów na osnowie zeolitu FAU:

$V_{3.0}FAU_{des} > V_{6.0}FAU > V_{3.0}FAU > V_{6.0}FAU_{des} > V_{1.0}FAU > V_{1.0}FAU_{des}$

- dla katalizatorów na osnowie BEA:

$V_{4.0}SiBEA > V_{7.0}SiBEA > V_{3.0}SiBEA > V_{2.0}SiBEA$

Analiza otrzymanych wyników umożliwiła również sformułowanie ogólnych obserwacji dotyczących zachowania badanych układów w reakcjach ODH. Katalizatory na osnowie BEA wykazywały niższe konwersje (maksymalna konwersja C_3H_8 wyniosła 38,6 % dla $V_{5.0}SiBEA$) niż katalizatory na osnowie FAU (maksymalna konwersja C_3H_8 wyniosła 40,4 % dla $V_{6.0}FAU$). Katalizatory hierarchizowane wykazywały selektywność wyższą niż ich wyjściowe formy (w T = 450 °C dla izokonwersji 5% propanu selektywność do C_3H_6 wynosiła 26,7 – 39,8 % w serii V_xSiBEA w porównaniu do 12,7 - 27,6 % w serii V_xBEA; w T = 450 °C dla izokonwersji 10% propanu selektywność do C_3H_6 wynosiła 41,2 – 65,0 % w serii V_xFAU_{des} w porównaniu do 18,9 – 31,7 % w serii V_xFAU).

W oparciu o wyniki obliczeń DFT:PBE/def2-TZVP zaproponowano mechanizm reakcji ODH propanu. wykorzystując najbardziej prawdopodobne modele wanadowych centrów aktywnych obecnych w pozycjach T2 i T3 zeolitu BEA. Oderwanie pierwszego atomu H z cząsteczki węglowodoru jest etapem limitującym. Dla pozycji T2 zachodzi ono na centrum $(-SiO)_3$-V=O: H odrywany jest przez grupę V=O, tworzona jest V-OH, czemu towarzyszy bariera energetyczna (E_{TS}) 42,0 kcal/mol. Dla pozycji T3 reakcja zachodzi na centrum $(-SiO)_4$-V-OH (E_{TS} = 42,9 kcal/mol) – H odrywany jest przez grupę V-OH, tworzy się H_2O. Oderwanie drugiego atomu wodoru zachodzi przy udziale tlenu wiążącego wanad z siecią (Si-O-V) i preferencyjnie odbywa się na innym centrum wanadowym, niż to, które uczestniczyło w oderwaniu pierwszego atomu H. Dla pozycji T2 na centrum $(-SiO)_3$-V=O bariera towarzysząca temu procesowi wynosi 19,5 kcal/mol (w porównaniu do 32,3 kcal/mol gdy H odrywane jest przez V=O). Dla pozycji T3 na centrum $(-SiO)_3$-V=O energia aktywacji drugiego atomu H wynosi 21,6 kcal/mol (reaktywność ugrupowania $(-SiO)_4$-V-OH w T3 w drugim etapie jest mniejsza: E_{TS} wynosi 33,3 kcal/mol gdy zakładany jest udział tlenu Si-O-V, zaś 40 kcal/mol przy udziale grupy V-OH).

5. Wpływ przeciwjonów na tworzenie i funkcjonalność membran polielektrolitowych

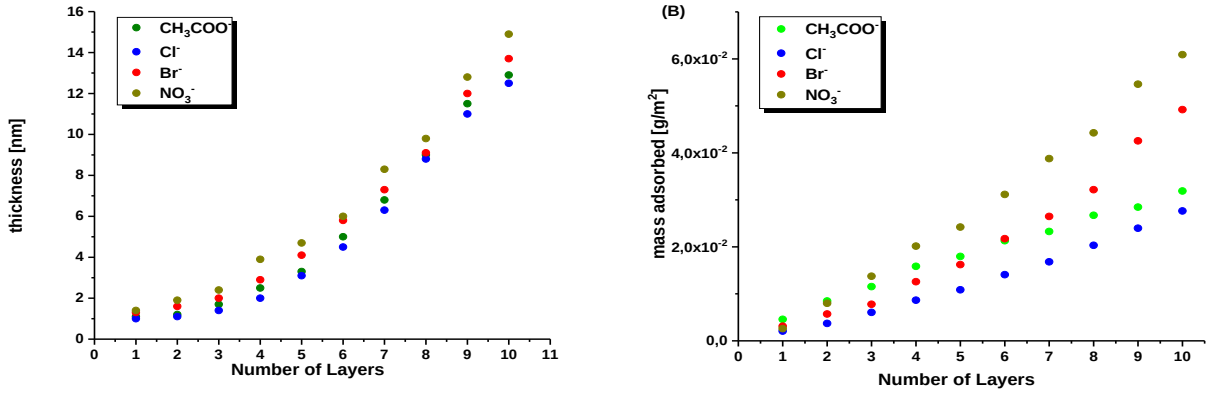
Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2016/23/B/ST8/03128 [2017-2021]
(kierownik projektu: dr hab. Marta Kolasińska-Sojka)

Zbadanie zależności struktury i właściwości multiwarstw polielektrolitowych od wybranych jonów z szeregu Hofmeistera to cel naukowy tego projektu. Ponieważ wpływ oddziaływania przeciwjonów z szeregu liotropowego na powstające filmy polielektrolitowe nie jest znany to zrozumienie mechanizmów odpowiedzialnych za tworzenie takich systemów może przyczynić się do projektowania materiałów o ściśle określonych parametrach, co w przyszłości poskutkuje poprawą właściwości selektywnych membran, biomateriałów oraz nanokontenerów/nośników substancji aktywnych.

Prowadzone prace dotyczyły kontynuacji wpływu jednowartościowych anionów: CH_3COO^-, Cl^-, Br^-, $NO3^-$, ClO_4^- na tworzenie wielowarstwowych filmów polielektrolitowych PAH/PSS oraz PDADMAC/PSS. Przy użyciu elipsometrii przeprowadzono badania grubości wielowarstw osadzanych w obecności wybranych elektrolitów podstawowych: $NaCH_3COO$, NaCl, NaBr, $NaNO_3$, $NaClO_4$ w sile jonowej I = 0.15 M.

Wyniki porównano z pomiarami masy dla analogicznych systemów, otrzymanymi przy użyciu mikrowagi kwarcowej.

1a) 1b)



Rys. 1 Grubości (1a) i masy (1b) filmów polielektrolitowych w funkcji ilości osadzonych warstw dla układu: PDADMAC/PSS

Grubość filmów w przypadku układu PDADMAC/PSS jest większa niż dla filmów o analogicznej ilości warstw ale zbudowanych z polielektrolitów PAH/PSS, co jest zgodne z naszymi dotychczasowymi badaniami. W przypadku układu PDADMAC/PSS obserwuje się większy wpływ przeciwjonu na zaadsorbowany film. Dla 10-warstwowych układów PDADMAC/PSS najniższa grubość jest dla filmu z przeciwjonem Cl^- natomiast najwyższa – dla NO_3^-. W przypadku filmów PAH/PSS, jest analogicznie, z tym, że dodatkowo przebadano filmy z przeciwjonem ClO_4^-, co nie było możliwe dla PDADMAC z powodu wytrącania się osadu w roztworze.

Badano przepuszczalności wielowarstw względem cząsteczek elektroaktywnych dla analogicznych filmów polielektrolitowych, nakładanych w obecności wybranych anionów jednowartościowych na złotych elektrodach dyskowych. Jako układ redox zastosowano 1:1 mM $K_3Fe(CN)_6$/ $K_4Fe(CN)_6$ w 0.15 M NaCl. W przypadku filmów 10-warstwowych dominujący jest efekt blokowania czynnika elektroaktywnego przez ilość warstw polielektrolitowych i różnice w przepuszczalności w zależności od zastosowanego przeciwjonu są znacznie subtelniejsze, choć nadal widoczne.

6. Dendrymery jako platforma do projektowania biologicznie czynnych nośników

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2017/ST5/02788 [2017-2021]
(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska, wykonawcy: mgr inż. Magdalena Szota, mgr Kamil Rakowski)

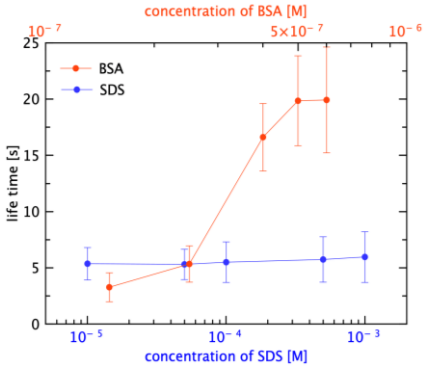
Właściwości fizykochemiczne nanonośników są podstawowymi parametrami w projektowaniu systemu dostarczania leków (DDS). Prowadzone badania dotyczyły charakterystyki dendrymerów G5.5 PAMAM oraz tworzenia kompleksów z albuminą surowicy bydlęcej (BSA). Pomiary ruchliwości elektroforetycznej wykazały, że ładunek dendrymeru w zakresie pH 3-5 jest dodatni ze względu na protonowanie trzeciorzędowych grup aminowych. Powyżej pH 5 dendrymer posiada ładunek ujemny indukowany przez powierzchniowe grupy karboksylowe. Punkt izoelektryczny dla G5.5 występuje przy pH 5. Wielkość cząstek w niskim zakresie pH wynosi 3,5 nm, ale powyżej pH 7,5 wzrasta w wyniku protonowania grupy karboksylowej. Tworzenie stabilnego kompleksu dendrymer-białko monitorowano za pomocą metody UV-vis oraz pomiarów potencjału zeta. Obecność w widmie UV-Vis piku przy 278 nm, pochodzącego od tryptofanu w cząsteczce BSA, potwierdza unieruchomienie cząsteczek białka na powierzchni dendrymeru. Co więcej, spadek potencjału powierzchniowego również oznacza, że cząsteczki białka wiążą się z powierzchnią dendrymeru. Właściwości i stabilność otrzymanych kompleksów monitorowano w warunkach dynamicznych metodą QCM-D. Stwierdzono, że kompleksy nieodwracalnie adsorbują się na powierzchni Au, przeciwnie niż dendrymer, który ma tendencję do desorpcji przy wysokim pH, gdy jest naładowany ujemnie. Podczas tworzenia dwuwarstwy nie obserwuje się znaczących różnic. Jedynie zwilżalność powierzchni zmienia się wraz ze zmianą zewnętrznej warstwy adsorpcyjnej. Kąt zwilżania jest niższy, gdy warstwa BSA jest ostatnią warstwą, która jest zaadsorbowana na sensorze. Pomiary CD potwierdzają, że drugorzędowa struktura BSA ulega zmianie przez interakcję z dendrymerami G5.5, przy czym najbardziej znaczące zmiany obserwuje się przy dużym nadmiarze dendrymerów w stosunku do białka. BSA wiąże się z powierzchnią G5.5 PAMAM poprzez dodatnio naładowaną domenę III, tworząc otoczkę białkową lub koronę na powierzchni nośnika. Jest to korzystne dla potencjalnego zastosowania układu jako DDS, ponieważ hamuje adsorpcję białek osocza na powierzchni dendrymeru, zmniejsza toksyczność układu i zapobiega szybkiemu usuwaniu z krwi, wydłużając czas krążenia. Właściwości biologiczne i biodostępność ulegają również poprawie, gdy powstaje stabilny kompleks białko-dendrymer.

7. W poszukiwaniu efektywnych i przyjaznych środowisku spieniaczy i emulgatorów – ilościowy opis stabilności cienkich filmów ciekłych w roztworach "zielonych" surfaktantów

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2017/25/B/ST8/01247 [2018-2021]
(kierownik projektu: dr hab. Jan Zawała, prof. IKiFP PAN)

Celem projektu są badania nad potencjałem aplikacyjnym biosurfaktantów jako nowych, efektywnych i przyjaznych środowisku stabilizatorów filmów pianowych i emulsyjnych, powstających w warunkach dynamicznych. Badania mają na celu opis kinetyki wyciekania symetrycznych filmów ciekłych (pianowych i emulsyjnych), tworzących się na granicach faz ciecz/gaz i ciecz/ciecz przez uderzające pęcherzyki i/lub krople olejowe w roztworach biodegradowalnych surfaktantów. Jednym z bardzo ważnych parametrów, decydujących o stabilności filmów ciekłych jest prędkość pęcherzyka w roztworze, na którą kluczowy wpływ ma kinetyka tworzenia tzw. dynamicznej warstwy adsorpcyjnej.

W okresie sprawozdawczym, w celu oceny kinetyki tworzenia dynamicznej warstwy adsorpcyjnej (DAL) oraz jej wpływu na stabilność ciekłych filmów w roztworach biosurfaktantu, wyznaczono profile prędkości pęcherzyków w roztworach BSA(albuminy surowicy cielęcej) oraz, dla porównania, prostego anionowego surfaktantu SDS (dodecylosiarczanu sodu). Następnie, dla obu surfaktanów zmierzono kinetykę koalescencji pojedynczych pęcherzyków na powierzchni roztworu, wyznaczając tzw. „czasy życia" (τ). Wartości τ zależały bezpośrednio od kinetyki wyciekania filmu ciekłego do tzw. krytycznej grubości pękania. Eksperymenty prowadzono w pH odpowiadającym naturalnemu środowisku (bez dodatku kwasu lub zasady). Zakres stężeń obu badanych surfaktantów wybrany został tak, aby pokrywał stopniowe zmiany prędkości pęcherzyka, tj. odzwierciedlał stopniową zmianę hydrodynamicznych warunków brzegowych od tzw. warunków *slip* do *no-slip* (kiedy powierzchnia pęcherzyka jest całkowicie unieruchomiona). Wykazano, że w przypadku obu badanych substancji profile prędkości pęcherzyka (zmiany prędkości w czasie) były bardzo podobne – w zależności od stężenia prędkość pęcherzyka zmniejszała się stopniowo, przechodząc przez maksimum, od wartości maksymalnej (~35 cm/s) do minimalnej (~15 cm/s). Charakter zmian prędkości pęcherzyka wskazywał, że w obu przypadkach na jego powierzchni indukowana jest DAL. Pomimo praktycznie identycznego wpływu surfaktantów na profile prędkości pęcherzyka zaobserwowano jednak, że kinetyka koalescencji (stabilność filmów ciekłych) znacząco się różni. Dla roztworów SDS czas koalescencji był praktycznie niezależny od stężenia, natomiast dla roztworów BSA czasy życia pęcherzyków rosły ze stężeniem, co może wskazywać na to, że struktura DAL w roztworach białek jest odmienna od tej, którą postuluje się dla prostych substancji powierzchniowo-aktywnych. Zaplanowane badania ewolucji grubości filmów ciekłych w czasie mają na celu weryfikację tej hipotezy.



Rys. 1. Czasy życia pojedynczych pęcherzyków na powierzchni roztworu BSA oraz SDS o różnych stężeniach

8. Surfaktanty i kopolimery czułe na zmiany pH jako komponenty do tworzenia nanonośników

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2017/25/B/ST4/02450 [2018-2021]
(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu, realizowanego przez konsorcjum dwóch grup badawczych (z Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera i Zakładu Technologii Organicznej i Farmaceutycznej Politechniki Wrocławskiej, jest opracowanie podstaw naukowych nowatorskiej strategii tworzenia nanostruktur wrażliwych na zmiany pH w postaci cienkich filmów lub nanokapsułek. Wykorzystanie nowo-zsyntetyzowanych amfoterycznych surfaktantów, zawierających łańcuchy hydrofobowe o różnych długościach w połączeniu z polielektrolitami oraz/lub amfifilowymi polielektrolitami z grupami hydrofobowymi szczepionymi do szkieletu polimerowego przez łącznik pH-labilny, pozwoli na wytwarzanie nanostruktur, które pod wpływem zmian pH będą ulegać dekompozycji. Użycie tego typu komponentów pozwoli na tworzenie nanostrukturalnych cienkich filmów o kontrolowanej hydrofobowości lub o właściwościach anty-drobnoustrojowych, wrażliwych na zmiany środowiska.

Zsyntetyzowane zostały amfifilowe polielektrolity na bazie poli (4-styrenosulfonowego kwasu ko-maleinowego) (PSS / MA) z łańcuchami węglowodorowymi (C12 lub C16) połączonymi wrażliwymi na pH grupami amidowymi i estrowymi. Uzyskany stopień hydrofobizacji wynosił 15% lub 40%. Za pomocą pomiarów napięcia powierzchniowego i międzyfazowego (granica faz woda/dekan) metoda analizy kształtu kropli stwierdziliśmy znaczące różnice w zależności od zastosowanego łącznika. Hydrofobizowane polielektrolity z łącznikiem estrowym charakteryzowały się niższą aktywnością powierzchniową od polimerów z łącznikiem amidowym. Na podstawie przeprowadzonych symulacji metodą dynamiki molekularnej określiliśmy, że przyczyną obserwowanych różnic mogą być domeny hydrofobowe tworzone wzdłuż łańcucha polielektrolitowego przez łańcuchy hydrofobowe. W przypadku łączników amidowych, ze względu na intermolekularne wiązania wodorowe pomiędzy grupami amidowymi i karboksylowymi segmentów maleinowych, jest energetycznie korzystniejsze przeniesienie segmentów hydrofobowych z wnętrza roztworu na powierzchnie niż w przypadku łączników estrowych.

Za pomocą techniki QCM-D zbadano adsorpcję hydrofobizowanych i niemodyfikowanych kopolimerów PSS/MA na granicy faz ciecz/ciało stałe. Kopolimery adsorbowano na powierzchniach pokrytych wielowarstwowym filmem polielektrolitowym (PSS/PDADMAC). Zaadsorbowane filmy polimerowe poddano działaniu roztworów o pH 3 i pH 11. Przeprowadzono również badania zwilżalności powierzchni wafli krzemowych pokrytych filmem wielowarstwowym (PSS/PDADMAC) z zaadsorbowanymi kopolimerami. Stwierdziliśmy, że adsorpcja hydrofobizowanych polielektrolitów prowadzi do wzrostu katów zwilżania na powierzchniach pokrytych filmem wielowarstwowym. Po ekspozycji filmów do roztworów o pH 3 i pH 11 obserwujemy odpowiednio spadek i wzrost ich masy, przy czym zmiany te są odwracalne i związane ze zmiana hydratacji filmów. Po pokryciu filmów hydrofobizowanymi polielektrolitami są one stabilniejsze w stosunku do pokrytych niemodyfikowanym PSS/MA. Zastosowanie techniki ATR FTIR pozwoliło na korelację zmian w różnicowych widmach w zakresie 2800 – 3800 cm^{-1} odpowiadającemu drganiom rozciągającym dla cząsteczki wody ze stopniem hydrofobowości filmu. W przypadku adsorpcji na podłożu stałym nie stwierdziliśmy znaczących różnic w zależności zastosowanego łącznika pomiędzy łańcuchem polielektrolitowym a ugrupowaniami hydrofobowymi.

Przeprowadzono również badania wykorzystania hydrofobizowanych polielektrolitów kationowych do stabilizacji emulsji oraz właściwości antybakteryjnych polielektrolitów anionowych funkcjonalizowanych czwartorzędowymi ugrupowaniami aminowymi.

9. Badania oddziaływania nanorurek węglowych z telomerycznym DNA przy użyciu metod dynamiki molekularnej

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr 2017/27/B/ST4/00108 [2018-2021]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Tomasz Pańczyk)

Przeprowadzono obliczenia mające na celu zbadanie efektu stabilizacji struktury niekanonicznej iM w wyniku oddziaływania z jednościennymi nanorurkami węglowymi. Dotychczasowe wyniki uzyskane w odniesieniu do badań wpływu struktury przestrzennej SWCNT na stabilność iM oraz wpływu grup funkcyjnych przyłączonych do SWCNT nie przyniosły wyjaśnienia tego efektu. Dlatego poddano szczegółowej analizie procesy transferu protonu z grup karboksylowych zlokalizowanych w strukturze SWCNT do triad cytozyn obecnych w telomerycznym fragmencie dsDNA. Badania składały się dwóch etapów; wyznaczenia geometrycznej i energetycznej 'dostępności' triad cytozyn przez grupy karboksylowe przy użyciu sterowanej klasycznej dynamiki molekularnej oraz kwantowochemicznego zbadania procesów transferu protonu dla układów w których z uwagi na geometryczną dostępność taki proces był fizycznie prawdopodobny. Okazało się, że triady cytozyn są dość dobrze dostępne zarówno dla nanorurek z grupami karboksylowymi zlokalizowanymi na krańcach SWCNT jak i na ściankach bocznych. Dla obu sytuacji wybrano układy dla których przeprowadzono analizę wymuszonego transferu protonu z użyciem metody EGO (enforced geometry optimization). W wyniku stwierdzono, że w żadnym z badanych układów bezpośredni transfer protonu nie jest możliwy lecz konieczna jest obecność wody jako nośnika protonu bądź katalizatora.

W kolejnym zadaniu analizie poddano model nośnika leku w którym wykorzystano kowalencyjne przyłączenie iM do krańców SWCNT oraz wykorzystano zdolność iM do odwracalnych zmian struktury przestrzennej do kontroli wiązania/uwalniania DOX z takiej struktury. Wykazano, że DOX może pełnić dwojaką rolę w strukturze nośnika: może być aktywatorem oraz cząsteczką czynną. Aktywacja nośnika polega na tym, że cząsteczki DOX interkalują w strukturze iM w pH obojętnym i blokują inne cząsteczki DOX we wnętrzu nanorurki. Natomiast w pH kwaśnym cząsteczki DOX są słabo związane ze strukturą i-motif i ulegają spontanicznej desorpcji ze struktury nośnika. To prowadzi do odblokowania innych cząsteczek DOX zamkniętych we wnętrzu SWCNT. Efekt ten ma bardzo duże znaczenie w konstrukcji nośników DOX opartych na wykorzystaniu iM i nie wymaga on bardzo złożonych mechanizmów działania jakie są proponowane w literaturze.

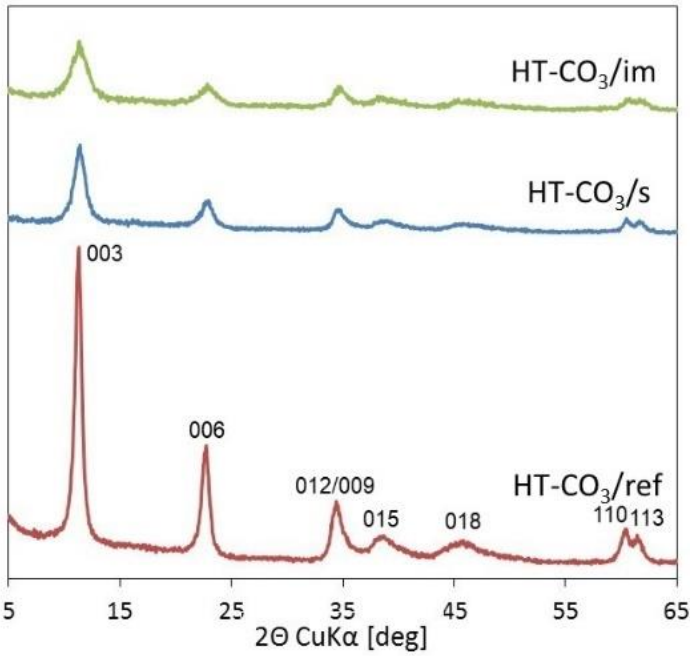
W dalszym kroku efekt interkalacji DOX w obrębie kłębków iM w pH neutralnym został wykorzystany do zbadania transportu i kontrolowanego uwalniania innej cząsteczki, a mianowicie karmustyny. Cząsteczka ta jest silnie hydrofobowa a jednocześnie bardzo nietrwała w kontakcie z wodą. Przeprowadzone badania doprowadziły do ciekawych i pożytecznych wniosków. Mianowicie wykazano, że zamknięcie karmustyny we wnętrzu nanorurki oraz wprowadzenie pewnej ilości DOX jako aktywatora prowadzi do uzyskania układu w którym dostęp wody do cząsteczek karmustyny można regulować przez pH środowiska. Dodatkowo wykazano, że w wyniku rozpadu karmustyny spontanicznie z wnętrza nanorurki może uciec jedynie rzeczywisty czynnik alkilujący DNA natomiast najbardziej niepożądany składnik tj. czynnik karbamylujący białka jest zatrzymywany we wnętrzu nanorurki. Oznacza to, że zastosowanie CNT może przynieść znaczną redukcję efektów ubocznych w terapii karmustyną.

10. Biopolimery jako templaty do otrzymywania nanostrukturalnych materiałów hydrotalkitopodobnych i ich kalcynowanych pochodnych do zastosowań katalitycznych

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr 2017/27/B/ST5/01834 [2018-2021]
(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Celem badań jest stworzenie podstaw dla projektowania i syntezy nanostruktur hydrotalkitopodobnych (HT) przy zastosowaniu powszechnie dostępnych, tanich i przyjaznych środowisku biopolimerów, takich jak skrobia czy żelatyna, w charakterze miękkich templatów strukturalnych. Podejście to stanowi “zieloną” alternatywę dla stosowania droższych, bardziej złożonych i mniej pro-ekologicznych procedur opartych o templaty syntetyczne typu surfaktantów, czy ko-polimerów blokowych.

W ramach badań porównano, m.in., dwa sposoby otrzymywania drobnokrystalicznych materiałów HT: (1) metodę odwróconej mikroemulsji, wymagającą użycia surfaktantów (preparaty HT/im) i (2) współstrącanie w obecności skrobi jako biotempaltu (preparaty HT/s). W obu przypadkach otrzymano HT wyraźnie słabiej krystaliczne niż konwencjonalnie współstrącane próbki referencyjne (Fig. 1). Otrzymano węglanowe, chlorkowe i bromkowe formy HT, które scharakteryzowano przy pomocy XRD, SEM/EDX i FTIR, oraz zastosowano jako katalizatory utleniania Baeyera-Villigera cykloheksanonu do ε-kaprolaktonu przy pomocy układu H_2O_2/acetonitryl. Formy bromkowe okazały się znacznie mniej aktywne niż chlorki i węglany, ponieważ promowały nieselektywny rozkład H_2O_2. Materiały drobnokrystaliczne były bardziej aktywne niż lepiej krystaliczne próbki referencyjne. Katalizatory otrzymane metodą odwróconej mikroemulsji były mniej krystaliczne i bardziej aktywne niż preparaty otrzymane w obecności skrobi, ale ulegały szybszej degradacji w kwasowym środowisku reakcji. Alkalizacja medium reakcyjnego dodatkiem $NaHCO_3$ pozwoliła na stabilizację materiałów HT. Wydajność ε-kaprolaktonu wzrosła i stała się porównywalna dla obu drobnokrystalicznych form HT. Otrzymane wyniki wykazały, że tańsza i łatwiejsza preparatyka w obecności skrobi jest preferowaną metodą syntezy drobnokrystalicznych materiałów HT.



Rys. 1. Dyfraktogramy proszkowe otrzymanych węglanowych form HT.

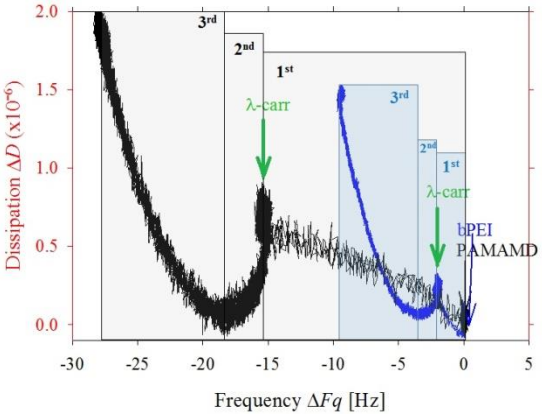
11. Nowe biomateriały zawierające polisacharydy jako efektywna platforma do adsorpcji i uwalniania czynników wzrostu fibroblastów: zastosowania w diagnostyce i w leczeniu chorób cywilizacyjnych

Projekt badawczy "OPUS" NCN 2018/31/B/ST8/03277 [2019-2023]
(kierownik projektu: dr hab. Aneta Michna)

Głównymi celami niniejszego projektu jest opis powstawania i stabilność biokompatybilnych filmów makrojonowych oraz wyjaśnienie mechanizmów wiązania czynników wzrostu fibroblastów z tymi wielowarstwami.

Biokompatybilne makrojony (polisacharydy): karagen, chitozan, heparyna zostały scharakteryzowane w objętości. Wyznaczono średnice hydrodynamiczne, potencjały zeta i ładunki elektrokinetyczne w różnych typach elektrolitów, siłach jonowych oraz w szerokim zakresie pH. Wykonane pomiary lepkości dynamicznej rozcieńczonych roztworów karagenu umożliwiły określenie lepkości wewnętrznej karagenu dla różnych sił jonowych. Wyznaczona lepkość wynosiła 50000 dla rozcieńczonych roztworów elektrolitów, a więc znacznie więcej niż 2,5 tj. lepkość określona przez Einsteina dla obiektów kulistych. Obliczenia teoretyczne wykazały, że cząsteczki karagenu przyjmują kształt wydłużony oraz umożliwiły określenie odległości koniec-koniec, promienia żyracji (kłębka statystycznego) i gęstości karagenu.

Określono również kinetykę adsorpcji/desorpcji karagenu na/z warstw kotwiących w zdefiniowanych warunkach transportu (dyfuzja i konwekcja).



Rys. 1 Zależność zmian dyssypacji (*ΔD*) od zmian częstotliwości (*ΔFq*) określona odpowiednio dla biwarstw dendrymery (PAMAMD)/ karagen (λ-car) (czarna krzywa) i polietylenoiminy (bPEI)/ λ-car (niebieska krzywa) Strzałki pokazują początek wstrzyknięcia roztworów: PAMAMD (czarny), bPEI (niebieski) i λ-car (zielony). Stężenia makrojonów w objętości wynosiły 1 mg L^{-1}, siła jonowa 0,01 M, pH 5,8. 1,2 i 3 określają etapy tworzenia biwarstwy.

Zastosowanie technik badawczych takich jak: QCM-D, AFM, OWLS umożliwiło szczegółowy wgląd w mechanizm adsorpcji polisacharydów kontrolowanej głównie oddziaływaniami elektrostatycznymi. Wykazano, że wydajność adsorpcji makrojonów jest ściśle skorelowana z wartością potencjałów zeta warstw kotwiących, rodzajem transportu i początkowym stężeniem masowym makrojonów. Przeprowadzone pomiary wykazały, że monowarstwy dendrymerów oraz biwarstwy: dendrymery/ karagen i polietylenoamina/ karagen charakteryzują się wysokim stopniem hydratacji (sięgającym 60%), w przeciwieństwie do monowarstw karagenu odznaczających się niskim stopniem hydratacji. W niskich początkowych stężeniach objętościowych, łańcuchy karagenu adsorbują się w konformacji "side-on". Konformacja "end-on" jest preferowana w trakcie adsorpcji z wysokiego stężenia objętościowego, a zaadsorbowane łańcuchy tworzą wysoce uwodnione "szczotki polimerowe". Stwierdzono, że biwarstwy dendrymer/ karagen są cięższe i bardziej lepkie/ miękkie niż biwarstwy zbudowane na warstwie polietylenoiminy.

12. Nowe kompozyty smektytów z nanocząstkami TiO_2 otrzymanymi metodą odwróconej mikroemulsji do zastosowań fotokatalitycznych

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr-2018/31/B/ST5/03292 [2019-2023]
(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Celem badań przewidzianych w projekcie jest: a) otrzymanie kompozytów TiO_2/smektyt wg innowacyjnej procedury łączącej eksfoliowane organosmektyty z nanocząstkami TiO_2 wytworzonymi metodą odwróconej mikroemulsji, oraz b) wykorzystanie tak otrzymanych materiałów jako fotokatalizatorów do oczyszczania wody z organicznych zanieczyszczeń. Proponowana metoda syntezy stwarza możliwość kontroli właściwości kompozytów przez: a) zmianę rodzaju smektytu, b) zmianę organokationu, c) modyfikację nanocząstek tlenku przez dobór parametrów syntezy mikroemulsji. Ponadto, metoda odwróconej mikroemulsji pozwala na syntezę układów wieloskładnikowych, co daje możliwość chemicznej modyfikacji fotokatalizatora.

Roztwór podpierający przygotowany z prekursora $TiCl_4$ wykorzystano do otrzymania odwróconej mikroemulsji tytanowej, używając 1-heksanolu jako fazy olejowej i bromku cetylotrimetyloamoniowego jako surfaktantu. Mikroemulsja tytanowa była dodawana do organomontmorillonitu zdyspergowanego w 1-heksanolu i zobojętniana dodatkiem NaOH lub NH_3 (aq). Otrzymane osady dzielono na dwie części. Jedną kalcynowano w 600°C bezpośrednio po syntezie (Ti-IMEC), drugą poddawano dodatkowemu traktowaniu hydrotermalnemu w temperaturze 90°C w zamkniętych naczyniach teflonowych, pod autogenicznym ciśnieniem (Ti-IMEC$_{hydr}$). Dla porównania, otrzymano także preparaty montmorillonitowe podpierane w konwencjonalny sposób, oznaczone Ti-PILC. Wszystkie kompozyty scharakteryzowano przy pomocy XRD, SEM/EDS, TG/DSC i adsorpcji/desorpcji azotu w -196°C. Stwierdzono, m.in., że we wszystkich próbkach faza TiO_2 występowała w postaci anatazu, o największym stopniu krystaliczności w traktowanych hydrotermalnie kompozytach otrzymanych metodą odwróconej miceli. Otrzymane preparaty przetestowano w fotokatalitycznym rozkładzie Rodaminy B, modelowego zanieczyszczenia akwenów wodnych. Zaobserwowano następujący trend aktywności fotokatalitycznej: Ti-IMEC$_{hydr}$ > Ti-IMEC > Ti-PILC.

13. Gruboziarniste modelowanie węglowodanów

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr- 2019/35/B/ST4/01149 [2020-2024]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Wojciech Płaziński)

Konformacja glikozaminoglikanów oraz parametryzacja pola siłowego MARTINI 3 dla polimerów glukozy

Dokonano analizy wyników serii symulacji mających na celu zbadania konformacji glikozaminoglikanów na poziomie dokładności symulacji typu *all-atom* i w kontekście ich jednostek budulcowych. Stwierdzono ograniczoną zależność konformacji wiązania glikozydowego od typu funkcjonalizacji (sulfonacja lub N-acetylacja). Dominującą w tym kontekście rolę odgrywa niemal zawsze topologia wiązania glikozydowego. Wkład wiązań wodorowych między jednostkami disacharydu jak również dystorsji pierścienia iduronowego jest względnie niewielki. Określono typy sulfonacji mające największy potencjalny wpływ na załamania łańcucha glikozaminoglikanów. Udowodniono, że dane wygenerowane na poziomie disacharydów mają przełożenie na właściwości dłuższych łańcuchów, zbudowanych z tych samych jednostek.

W drugim etapie badań rozpoczęto parametryzację cukrów na poziomie *coarse-grained*. Wykorzystano nowoopracowany zestaw parametrów niewiążących MARTINI 3, zapewniający kompatybilność z liczymi cząsteczkami innego typu (rozpuszczalniki, błony lipidowe, białka), poddanymi niezależnej parametryzacji przez inne zespoły. Prace rozpoczęto od monomerów oraz polimerów glukopiranozy. Opracowano m.in. parametry dla monomerów glukozy oraz polimerów z wiązaniami typu β(1-4) (celuloza), α(1-4) (amyloza) i β(1-3) (kurdlan). Parametryzacji oraz walidacji dokonano w oparciu o symulacje typu *all-atom* (CHARMM w kontekście oddziaływań wiążących oraz parametrami typu promień gyracji polimeru) oraz dane eksperymentalne (np. wartości log P oraz dane dot. struktury kompleksów cukrów i ich oddziaływania z błonami lipidowymi).

14. Funkcjonalne warstwy i nanostruktury otrzymywane przy pomocy epitaksji z wiązek molekularnych wspomaganej zewnętrznymi czynnikami

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr- 2020/39/B/ST5/01838 [2021-2024]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Korecki)

W pierwszych miesiącach (6 miesięcy w 2021 roku) realizacji projektu zgodnie z planem podjęto zadania dotyczące modernizacji aparatury do nanoszenia i charakteryzacji epitaksjalnych warstw. Wykonano rysunki techniczne nowych i podlegających przeróbce elementów aparatury ultra wysokiej próżni (UHV) oraz zasymulowano i zoptymalizowano ich całościowe zestawienie i współdziałanie. Dotychczas wykorzystywane elementy aparatury próżniowej, takie jak komory, transfery nośników i manipulatory, które wymagają dostosowania do nowych nośników próbek zostały zdemontowane i przekazane do przeróbki.

Zakupiono i przetestowano w warunkach próżniowych magnetron do rozpylania jonowego. Konieczność stosowania wysokich ciśnień parcjalnych argonu do wytworzenia plazmy w magnetronie i stwierdzone w testach naparowywanie rozpylanego materiału na znaczący obszar komory wskazuje na potrzebę przeniesienia magnetronu z pierwotnie planowanego miejsca jego użytkowania do oddzielnej komory próżniowej. Do tego celu planowane jest wykorzystanie dotychczasowej komory preparacyjnej i oddzielenie jej od całego systemu próżniowego. Próbki z warstwami naniesionymi za pomocą magnetronu przenoszone będą do systemu UHV przy użyciu zaplanowanej do zakupu w projekcie walizki próżniowej.

Kluczowym zadaniem projektu jest zaprojektowanie, wytworzenie i przetestowanie nowych nośników na próbki, w których nanoszenie warstw (epitaksja z wiązki molekularnej) będzie możliwe z zastosowaniem pola magnetycznego, elektrycznego, a także naprężeń mechanicznych. W początkowym etapie realizacji tego zadania wykonano prototypy nośników z polem magnetycznym wytwarzanym przez magnesy stałe, co pozwoli na przykładanie pola zarówno w płaszczyźnie próbki jak i wzdłuż normalnej oraz prototypy nośników z polem wytwarzanym przez elektromagnes co umożliwi prace z regulowanym polem prostopadłym do płaszczyzny próbki. Przeprowadzono także pierwsze próby wyginania elastycznego podłoża (mika) jako przygotowanie do nanoszenia warstw poddanych naprężeniom mechanicznym.

15. Teranostyczne nanonośniki nowej generacji dla detekcji, diagnostyki i neuroprotekcyjnego leczenia niedokrwiennych uszkodzeń mózgu

Projekt badawczy „OPUS" NCN nr- 2020/39/B/NZ7/01913 [2021-2025]
(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)

Udar niedokrwienny mózgu, czyli nagłe zatrzymanie krążenia mózgowego krwi prowadzi do powstawania deficytów neurologicznych. Jest jedną z najczęstszych przyczyn śmierci i/lub długotrwałej niepełnosprawności u ludzi. Zgodnie z raportami Światowej Organizacji Zdrowia (WHO) aż 15 milionów ludzi na świecie choruje każdego roku na udar. Co więcej, biorąc pod uwagę obecną pandemię, istnieje coraz więcej dowodów, że również u pacjentów dotkniętych COVID-19 mogą wystąpić koagulopatie z powikłaniami zakrzepowo-zatorowymi, w tym udar niedokrwienny mózgu. Głównym ograniczeniem obecnego leczenia urazów niedokrwiennych/reperfuzyjnych jest nieskuteczne dostarczanie leków neuroprotekcyjnych do dotkniętej chorobą części mózgu przez barierę krew-mózg (BBB), przepuszczalną tylko dla małych, lipofilowe cząsteczek. Dodatkowo niektóre leki neuroprotekcyjne mogą oddziaływać na organizm, powodując toksyczność obwodową i liczne działania niepożądane. Teranostyka jest nową dziedziną medycyny polegającą na połączeniu funkcji terapeutycznej i diagnostycznej w jednym preparacie. Teranostyczne nośniki leków są w stanie nie tylko dostarczać lek do pożądanego narządu, ale jednocześnie dostarczanie może być monitorowane za pomocą technik obrazowania w celu optymalizacji celowania i dawkowania. Nośniki takie łączą zdolność enkapsulacji leków lipofilowych z wysoką wydajnością z możliwością ich wykrywania za pomocą technik obrazowania, metodą rezonansu magnetycznego (MRI) lub tomografii komputerowej. Ponadto powinny transportować lek do docelowego miejsca w organizmie bez jego utraty i uwalniać go w miejscu działania bez wywierania efektu terapeutycznego.

Głównym celem projektu jest opracowanie nowej strategii dostarczania substancji o działaniu neuroprotekcyjnym przy pomocy nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, nie wykazując negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie, a których obecność w danym obszarze mózgu może zostać pokazana poprzez obrazowanie metodą rezonansu jądrowego (MRI). Projekt ma charakter interdyscyplinarny w którym biorą udział zespoły z Instytutu Katalizy i Fizykochemii im. Jerzego Habera PAN, Instytutu Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytutu Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN oraz Collegium Medicum UJ. Opracowana zostanie metodyka enkapsulacji neuroprotektantów i środków kontrastowych w nanonośnikach o wielkości poniżej 150nm i powierzchniach funkcjonalizowanych do celowanego dostarczania.

W pierwszym etapie projektu jako kandydatów do enkapsulacji wytypowano dwa leki neuroprotekcyjne, cyklosporynę A (CsA) i takrolimus (FK506). Superparamagnetyczne nanocząstki tlenku żelaza (SPIONS) i kompleksy gadolinu-PLL (poli-L-lizyna) będą stosowane jako środki kontrastowe dla rezonansu magnetycznego. Jako metoda enkapsulacji zostanie zastosowana technika sekwencyjnego osadzania naładowanych nanoobiektów (polielektrolitów lub nanocząstek) na biokompatybilnych rdzeniach nanoemulsji lub polimerów. W rdzeniach zostaną umieszczone leki hydrofobowe. Środki kontrastowe do rezonansu magnetycznego będą zlokalizowane głównie w otoczkach nośnika.

Na kolejnych etapach projektu określona zostanie efektywność działania enkapsułowanych substancji oraz do ich lokalizacja ex-vivo, z wykorzystaniem doświadczalnych linii komórkowych SH-SY5Y oraz organotypowych hipokampa w deprywacji tlenowo-glukozowej (OGD). Eksperymenty in vivo określą biodystrybucję nanonośników i wydajność transportu do mózgu. W końcowej fazie projektu działanie nanonośników zawierających neuroprotektanty zostanie przetestowane w zwierzęcym modelu udaru niedokrwiennego mózgu u zwierząt (MCAO).

16. Badania nad kooperacją jonów metali w dwuatomowych centrach złożonych z jonów metali przejściowych

Projekt badawczy „OPUS LAP" NCN nr- 2020/39/I/ST4/02559 [2021-2024]
(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

W ramach niniejszego projektu planowane jest zbadanie reaktywności dwuatomowych centrów złożonych z metali przejściowych (TMI = Fe, Co, Mn, Ni) wprowadzonych do matryc zeolitowych jako nieorganicznych analogów miejsc aktywnych występujących w enzymach. Łącząc badania teoretyczne i doświadczalne w szczególności poszukuje się odpowiedzi na następujące pytania badawcze:

1. Co wpływa na mechanizm pękania wiązań w cząsteczkach O_2 i N_2O i tworzenia aktywnych form tlenu odpowiedzialnych za procesy selektywnego utleniania?
2. Jakie parametry wpływają na właściwości tzw. tlenu α, który może tworzyć się na dwuatomowych centrach TMI?
3. Jaka jest rola uwięzienia (tzw. *confinement effect*)?
4. Czy aktywność katalityczna w reakcjach selektywnego utleniania węglowodorów C2-C4 przez zeolity z wprowadzonymi parami jonów metali zmieniona / poprawiona w porównaniu do układów zawierających typowe centra jednoatomowe?

Odpowiedzi na powyższe pytania będą poszukiwane przez kontrolowaną syntezę dwuatomowych centrów złożonych z wybranych metali przejściowych wprowadzonych do matryc zeolitowych (proponowane są FER, MOR, *BEA lub SSZ-13). Otrzymane układy będą testowane w reakcjach selektywnego utleniania lekkich nasyconych i nienasyconych węglowodorów (etanu, propanu, etenu i propenu) celem zbadania ich zdolności do aktywacji inertnych wiązań C-H. Planowane badania zakładają połączenie badań doświadczalnych i teoretycznych, w których właściwości w/w centrów w matrycach zeolitowych będą porównane z modelami centrów enzymatycznych (modelowanych przez porfiryny).

W 2021 roku, stosując metodę umożliwiającą uzyskanie maksymalnej liczby dwujądrowych centrów TMI w zeolitach, przygotowano próbki Fe-FER. Preparaty zostały scharakteryzowane metodą FTIR, gdzie antysymetryczne drgania T-O-T są miarą stężenia jonów Fe w tzw. centrach β (gdzie tworzą centra dwuatomowe) oraz metodą UV-VIS stosowaną do detekcji jonów Fe(III) i ugrupowań Fe-okso. Próbki te następnie zostały poddane testom katalitycznym w reakcji utleniającego odwodornienia (ODH) propanu przy użyciu tlenu i syntetycznego powietrza. Celem porównania reaktywności preparatów zawierających dwuatomowe centra żelazowe w reakcji ODH propanu z materiałami, które nie posiadają takich centrów, zsyntezowano próbki Fe-ZSM-5 (o topologii uniemożliwiającej otrzymanie centrów dwuatomowych). Powyższe również scharakteryzowano metodami FTIR i UV-VIS.

Ponieważ lokalizacja Al w sieci zeolitowej jest parametrem kluczowym dla kontroli natury centrów metalicznych (izolowane vs pary) w zeolitach, rozpoczęto badania dystrybucji glinu w wybranych matrycach (mordenit, chabazyt, ultrastabilizowany zeolit Y – USY) celem doboru odpowiednich materiałów do kontrolowanej syntezy izolowanych TMI i ich par o różnych geometriach.

Skonstruowano szereg teoretycznych modeli centrów dwuatomowych złożonych z porfiryn Co, Mn, Fe i Ni oddalonych o siebie o 6 – 9 Å (z krokiem 0,5 Å). Obliczenia struktury elektronowej są w toku.

Projekty badawcze NCN „Sonatina”

1. Multifunkcjonalne kompozytowe powłoki chitozanowe dla biodegradowalnych stopów Mg

Projekt badawczy „SONATINA" NCN nr- 2021/40/C/ST5/00266 [2021-2024]
(kierownik projektu: dr Dzmitry Kharytonau)

Metalowe implanty ortopedyczne są szeroko stosowane w praktyce medycznej do naprawy kości i wykorzystywane w setkach tysięcy wykonywanych rocznie operacji. Tradycyjna koncepcja metalowych biomateriałów wymaga metali o podwyższonej odporności na korozję w organizmie pacjenta. Typowy okres użytkowania implantu tytanowego wynosi około 15 lat, dlatego większość pacjentów wymaga co najmniej jednej operacji kontrolnej lub wymiany implantu. Po dziesięcioleciach opracowywania strategii minimalizacji korozji metalowych biomateriałów, rośnie obecnie zainteresowanie wykorzystaniem biodegradowalnych metali jako alternatywy dla implantów biomedycznych. Oczekuje się, że metale te będą stopniowo korodować in vivo, uwalniając produkty korozji, które będą metabolizowane przez ludzki organizm. Implanty tego typu wspomogą gojenie tkanek, a następnie rozpuszczą się całkowicie. Niedawno opracowane biodegradowalne stopy na bazie magnezu zbyt szybko ulegają korozji, co powoduje radykalne zmniejszenie sztywności implantu przed zakończeniem procesu gojenia tkanek i generowanie dużych ilości gazowego wodoru. Brak odpowiedniej modyfikacji powierzchni biodegradowalnych stopów tego typu jest jedną z głównych, dotychczasowych barier ograniczających dalszy rozwój tej technologii. Jednym z możliwych sposobów modyfikacji powierzchni materiałów, w celu zwiększenia ich odporności korozyjnej, jest pokrycie odpowiednią polimerową warstwą ochronną. Chitozan jest naturalnym polimerem, który jest coraz częściej stosowany w zastosowaniach biomedycznych ze względu na jego nietoksyczność, doskonałą biokompatybilność, biodegradowalność, aktywność przeciwbakteryjną, zdolność tworzenia filmu, właściwości mechaniczne oraz niski koszt.

Wykonywany projekt koncentruje się na rozwinięciu podstaw naukowych procesu elektrolitycznego osadzania nowego rodzaju wielofunkcyjnych powłok kompozytowych na bazie chitozanu na powierzchni stopów magnezu. Wytworzone powłoki mają charakteryzować się podwyższoną odpornością na korozję i posiadać właściwości antybakteryjne. Podstawowym celem projektu jest opracowanie nowych metod osadzania elektrochemicznego, optymalizacja kluczowych parametrów procesu takich jak warunki osadzania, skład kąpieli, obróbka wstępna podłoża oraz szczegółowa charakterystyka właściwości uzyskanych powłok. Przeprowadzone zostaną systematyczne badania charakterystyki korozyjnej w roztworach odwzorowujących warunki fizjologiczne. Wraz z odpornością na korozję w testach in vitro określone zostaną właściwości antybakteryjne opracowanych powłok wobec typowych związanych z implantem bakterii Gram-dodatnich, takich jak Staphylococcus aureus i Staphylococcus epidermidis.

Zsyntetyzowane materiały będą charakteryzować się ulepszoną morfologią powierzchni, przyczepnością, właściwościami mechanicznymi, korozyjnymi i antybakteryjnymi. Nowe informacje naukowe uzyskane w ramach tego projektu pozwolą ocenić możliwość zastosowania powłok kompozytowych na bazie chitozanu do pokrywania implantów ulegających biodegradacji. Oczekuje się, że opracowane wielofunkcyjne powłoki będą miały istotny wpływ na upowszechnienie zastosowania tego typu implantów, co spowoduje zmniejszenie prawdopodobieństwa ich odrzucenia przez organizm pacjenta i doprowadzi do podniesienia długości i jakości jego życia.

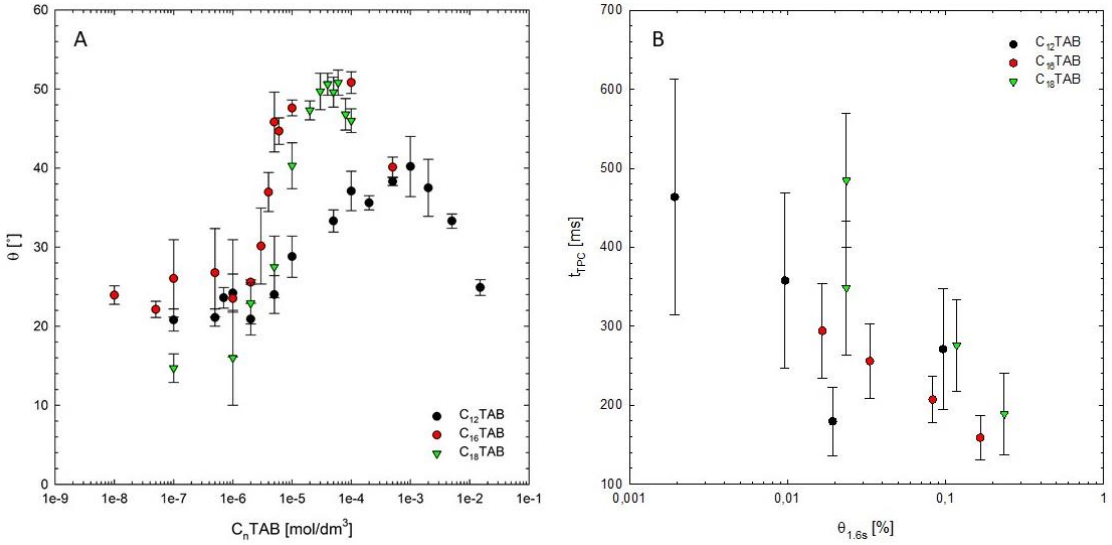
Projekty badawcze NCN „Preludium”

1. Wpływ kontrolowanego czasu adsorpcji na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach stałych o różnej hydrofobowości

Projekt badawczy „PRELUDIUM" NCN nr 2017/27/N/ST4/01187 [2018-2021]
(kierownik projektu: mgr inż. Agata Wiertel-Pochopień,
opiekun grantu: dr hab. Jan Zawała, prof. IKiFP PAN)

Celem projektu jest określenie wpływu kontrolowanego czasu adsorpcji na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe (TPC) w trakcie zderzeń pęcherzyków z powierzchniami ciał stałych o różnej hydrofobowości.

W roku 2021 przeprowadzono analizę wpływu długości łańcucha węglowodorowego bromków alkilotrimetyloamoniowych C_nTAB (bromek dodecylotrimetyloamoniowy - $C_{12}TAB$, bromek heksadecylotrimetyloamoniowy - $C_{16}TAB$, bromek oktadecylotrimetyloamoniowy - $C_{18}TAB$) na kinetykę tworzenia kontaktu trójfazowego (three-phase contact - TPC) przez uderzający pęcherzyk powietrza na powierzchni kwarcu w roztworach wyżej wymienionych substancji powierzchniowo-aktywnych. Na podstawie pomiarów kątów zwilżania (Rys. 1A) powierzchni kwarcu roztworami C_nTAB do analizy wybrano takie stężenia, w których wartość kąta zwilżania nie zwiększa się, co oznacza iż hydrofobizacja powierzchni ciała stałego nie ma istotnego wpływu na kinetykę tworzenia TPC, a ciekły film utworzony pomiędzy powierzchnią pęcherzyka a kwarcu pęka w wyniku oddziaływań elektrostatycznych. Drugim parametrem wpływającym na wybór stężeń surfaktantów była taka sama wartość pokrycia adsorpcyjnego cząsteczkami C_nTAB na granicy gaz/ciecz obliczona na podstawie równania Ward-Tordai, wykorzystując zależność napięcia powierzchniowego roztworów tych substancji w funkcji ich stężenia. W trakcie eksperymentów dotyczących kinetyki tworzenia kontaktu trójfazowego próbka kwarcu była ustawiana w odległości L=3mm od miejsca tworzenia się pęcherzyka, w celu wyeliminowania wpływu dynamicznej warstwy adsorpcyjnej (DAL) utworzonej na unoszącym się pęcherzyku na czas tworzenia TPC (t_{TPC}). Wraz ze wzrostem pokrycia adsorpcyjnego cząsteczkami C_nTAB na granicy gaz/ciecz czas tworzenia kontaktu trójfazowego skracał się (Rys. 1B). Na podstawie przeprowadzonych eksperymentów wykazano, iż nie występuje korelacja pomiędzy długością łańcucha węglowodorowego bromków alkilotrimetyloamoniowych a kinetyką tworzenia kontaktu trójfazowego na powierzchni kwarcu.



Rys. 1. (A) Kąty zwilżania powierzchni kwarcu oraz (B) zależność czasu tworzenia kontaktu trójfazowego przez uderzający pęcherzyk powietrza na powierzchni kwarcu od pokrycia adsorpcyjnego na granicy gaz/ciecz w roztworach $C_{12}TAB$, $C_{16}TAB$ oraz $C_{18}TAB$..

2. Wolframowa oksydoreduktaza aldehydu z *Aromatoleum aromaticum* – badania mechanizmu reakcji katalitycznej

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2017/27/N/ST4/02676 [2018-2021]
(*kierownik projektu: mgr inż. Agnieszka Winiarska,*
opiekun grantu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec)

Wolframowe enzymy oksydoreduktazy aldehydu (AOR) katalizują w obecności ferredoksyny odwracalną reakcję utlenienia aldehydów do odpowiednich kwasów karboksylowych, a z powodu szerokiego spektrum substratowego, przypisuje się im rolę w detoksykacji szkodliwych metabolitów aldehydowych w szlakach fermentacyjnej degradacji aminokwasów. Dotychczas znane AOR pochodzą z beztlenowych bakterii i archeonów, a spośród nich najmniejszą wrażliwością na tlen cechuje się wolframowa oksydoreduktaza aldehydu z *Aromatoleum aromaticum* (AOR_{Aa}).

Zaplanowane w projekcie badania mają na celu dostarczenie wiedzy o budowie centrum aktywnego enzymu i jego reaktywności, dzięki czemu możliwe będzie określenie mechanizmu reakcji AOR_{Aa}.

W wyniku badań reaktywności enzymu odkryto, że AOR_{Aa} katalizuje redukcję kwasów karboksylowych w obecności wodoru jako jedynego donora elektronów. Jest to nowa aktywność dla enzymów wolframowych, niezawierających podjednostki charakterystycznej dla dotychczas znanych hydrogenaz. Wykazano, że enzym jest w stanie zredukować m.in. kwas benzoesowy, p-hydroksybenzoesowy, transcynamonowy oraz nikotynowy. Aktywność z wodorem została również zbadana w redukcji kofaktora NAD^+ do NADH, co jest reakcją o znacznym potencjale wdrożeniowym. Dzięki zastosowaniu enzymu o aktywności hydrogenazy można regenerować kofaktor NADH w reaktorach biotechnologicznych z użyciem wodoru jako czystego donora elektronów (brak dodatkowych produktów ubocznych procesu redukcji).

We współpracy z Centrum SYNMIKRO działającym przy Uniwersytecie w Marburgu (Niemcy) enzym AOR_{Aa} został poddany badaniu mikroskopią krioelektronową i w wyniku analizy uzyskanych obrazów otrzymano strukturę enzymu o rozdzielczości 3.3 Å, charakteryzującą się składem podjednostek $(\alpha\gamma)_2\beta$. Jak wynika z poznanej struktury, podjednostka α zawiera jedno centrum żelazowo-siarkowe oraz kofaktor wolframowy o podobnej strukturze do kofaktora AOR z *Pyrococcus furiosus.* W odróżnieniu od AOR z archeonów, AOR_{Aa} posiada dodatkowo podjednostkę γ zawierającą 4 centra żelazowo-siarkowe oraz podjednostkę β zawierającą kofaktor FAD. Poznanie struktury enzymu potwierdziło niezwykle duże podobieństwo strukturalne podjednostki α z $AOR_{Aa,}$ z AOR z *Pyrococcus furiosus*. Wyznaczona struktura białka dostarczy również niezbędnych informacji dla badania mechanizmu reakcji poprzez testy aktywności enzymu z mutacjami aminokwasów w centrum aktywnym.

3. Analiza wpływu wybranych czynników na zmiany struktury α-synukleiny

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2020/37/N/ST4/02132 [2021-2023]
(kierownik projektu: mgr Paulina Komorek,
opiekun projektu: prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska)

Choroba Parkinsona to choroba neurodegeneracyjna, która dotyczy około 2% populacji po ukończeniu 60 roku życia. Charakteryzuje się głównie zaburzeniami narządu ruchu i objawia się głównie bradykinezją, drżeniem i sztywnością mięśni oraz utratą koordynacji. Znakiem rozpoznawczym choroby jest pojawienie się ciał Lewy'ego – charakteryzujących się nieprawidłową agregacją białek, które rozwija się w komórkach nerwowych. Badania nad składem ciał Lewy'ego wykazały, że zawierają głównie α-synukleinę, która występuje w niewłaściwie sfałdowanych formach i może być przyczyną śmierci neuronów. Chociaż przeprowadzono już sporo badań dotyczących struktury α-synukleiny, wciąż wiele kwestii dotyczących zmian II rzędowej struktury tego białka oraz przyczyn jego toksyczności nie jest do końca poznanych. Nieprawidłowe fałdowanie białka może być inicjowane poprzez zaburzenie oddziaływań pomiędzy poszczególnymi domenami α-synukleiny. Celem prowadzonych badań jest znalezienie kluczowych czynników odgrywających rolę w procesie adsorpcji na powierzchni stałej na strukturę α-synukleiny. Badania zmian struktury białka są prowadzone z zastosowaniem szeregu metod fizykochemicznych obejmujących charakterystykę białka w roztworze oraz na powierzchni adsorpcyjnej. Zastosowanie szerokiego spektrum badań spektroskopowych pozwala monitorować wpływ wybranych czynników w kontekście zmian zachodzących na poziomie molekularnym i mających istotny przyczynek do powstawania nieprawidłowych struktur białkowych.

4. Opracowanie racjonalnych wytycznych środowiskowych na potrzeby krótko-trwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych w budynkach zabytkowych

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2020/37/N/HS2/01727 [2021-2023]
(kierownik projektu: mgr inż. Magdalena Soboń,
opiekun projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz)

W ramach projektu rozpoczęto prace nad opracowaniem racjonalnych, opartych na wynikach badań, wytycznych dotyczących kontroli klimatu we wnętrzach zabytkowych, co pozwoli kustoszom i właścicielom podobnych budynków podejmować decyzje mające na celu ochronę pozostającego pod ich opieką dziedzictwa kultury, stanowionego w głównej mierze przez masywne obiekty drewniane, tj. rzeźby i elementy dekoracyjne. Projekt ma na celu w szczególności określenie bezpiecznej strategii ogrzewania zabytkowych wnętrz na potrzeby krótkotrwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych.

Na potrzeby badań rozwinięto dwuwymiarowy model masywnego drewnianego elementu do analizy procesu propagacji pęknięć pod wpływem wahań klimatu w drewnie lipowym. Model został stworzony w programie COMSOL Multiphysics i pozwala na rozwiązywanie problemów fizycznych metodą elementów skończonych. W badaniach wstępnych użyto parametrów drewna lipowego określonych we wcześniejszych pomiarach prowadzonych przez grupę Badań nad Dziedzictwem Kultury, które po przeprowadzeniu dodatkowych pomiarów w toku projektu PRELUDIUM-19 zostaną uaktualnione o zmierzone własności materiałowe.

W analizie rozwoju pęknięć w masywnych obiektach z drewna lipowego przyjęto szybkość uwalniania energii (G) jako parametr determinujący ryzyko uszkodzenia. Wartość krytyczną G_{Ic} drewna lipowego uznano za kryterium zagrożenia, którego przekroczenie powoduje przyrost głębokości pęknięcia w rzeźbie. Przeprowadzono wstępne symulacje numeryczne zmiany G w wyniku nagłego spadku wilgotności względnej (RH) oraz w wyniku zmian cyklicznych odzwierciedlających rzeczywistą zmienność klimatu wnętrz zabytkowych. Pozwoliło to na wyznaczenie bezpiecznej amplitudy i czasu spadku RH związanego z epizodem grzewczym, poniżej których istniejące pęknięcie nie będzie się pogłębiać.

W kolejnym kroku przeprowadzono analizę przypadku występowania w rzeźbie kilku pęknięć. Wstępnie rozważono istnienie dwóch pęknięć i obliczono zmianę G w wyniku nagłego spadku RH. Przeprowadzona analiza wykazała, że dla głębokich pęknięć wartości G otrzymywane dla dwóch pęknięć są niższe niż dla pojedynczego pęknięcia. Zaplanowano poszerzenie symulacji dla większej liczby pęknięć.

Uzyskane wyniki symulacji komputerowych zaprezentowano na konferencji CollectionCare i warsztacie Imaging Cultural Heritage: technologies, methods, models and risk assessment workshop.

We wstępnej analizie ryzyka propagacji pęknięcia posłużono się wartością G_{Ic} oszacowaną na podstawie literatury. W celu jej eksperymentalnego wyznaczenia pozyskano próbki drewna lipowego o odpowiedniej geometrii. Pozyskano również próbki „dog-bone”, które posłużą do wyznaczenia pozostałych właściwości mechanicznych lipy.

Projekty badawcze NCN „Beethoven”

1. Dynamika ściany domenowej i właściwości magnetycznej tekstury w warstwach magnetycznych z oddziaływaniem typu Dzyaloshinskii-Moriya

Projekt badawczy „BEETHOVEN" NCN nr 2016/23/G/ST3/04196 [2018-2022]
(kierownik projektu: dr Piotr Mazalski)

W ramach realizacji projektu wykonywane były badania nad różnego typu ultracienkimi warstwami magnetycznymi (warstwy osadzane techniką sputteringu i epitaksji z wiązki molekularnej), w których oczekiwano oddziaływania typu Dzyaloshinskii-Moriya (DMI).

Badane były warstwy z niesymetrycznym typem interfejsów NiO/Co/Ir i NiO/Co/Pt, w których warstwa ferromagnetyczna (Co) stykała się z warstwą niemagnetyczną (Pt lub Ir) i antyferromagnetyczną (NiO). Badania techniką spektroskopii rozpraszania Brillouina (BLS) wykazały istnienie jednej z większych wartości DMI (głownie w przypadku otoczenia NiO i Pt), natomiast pomiary z wykorzystaniem mikroskopu magnetooptycznego pozwoliły zwizualizować magnetyczną strukturę domenową z asymetrycznym ruchem ściany domenowej indukowanego polem magnetycznym przełożonym prostopadłe i w płaszczyźnie warstwy. Zaplanowane zostały kolejne próbki tego typu do badań nad temperaturowym: (i) rozmagnesowywaniem struktury domenowej, (ii) indukowaniem zmian anizotropii magnetycznej i właściwości magnetooptycznych, (iii) wytwarzaniem struktur domenowych typu domen cylindrycznych/skyrmionów.

Przeprowadzono również pilotażowe badania nad warstwami typu W/Co/Pt i Pt/Co/W pod kątem ich właściwości magnetycznych i magnetooptycznych, jak również występowaniem oddziaływania DMI. Wstępnie uzyskane wyniki wykazały bardzo ciekawe właściwości magnetyczne silnie zależne od grubości warstwy W oraz dużą wartość DMI. Zaobserwowano również nietypowe zachowanie magnetycznych struktur domenowych zwłaszcza w zakresie bardzo cienkich grubości Co. Komplementarne badania nad tego typu warstwami będą dalej kontynuowane.

Wykonywano również badania nad różnego typu wielowarstwami Ir/Co/Pt i Pt/Co/Ir. W próbkach tego typu zaobserwowano silną zależność oddziaływania DMI w zależności zarówno od kolejności warstw, grubości Co i ilości powtórzeń. Intersującym okazał się również ciekawy efekt rezonansu pochodzący najprawdopodobniej od ścian domenowych – rezonans zależny od ilości powtórzeń i „siły" oddziaływania DMI. Do głębszej analizy tego zjawiska potrzebne jest wykonanie badań z wykorzystaniem techniki np. BLS co będzie kontynuowane.

Przeprowadzone symulacje mikromagnetyczne rozkładów magnetyzacji w różnych warstwach uwzględniających różne stałe m.in. anizotropii magnetycznej, współczynnika DMI pozwoliły na głębszą analizę obserwowanych zmian w magnetycznej strukturze domenowej.

W ramach pobytu u partnera projektu w Kilonii (Niemcy) wykonane zostały testowe pomiary na ultracienkich warstwach W/Co/Pt z wykorzystaniem technik mikroskopii magnetooptycznej połączonej z synchronizowaną impulsową techniką rejestracji obrazów i błysków światła. Wykonano również próby obrazowania ruchu domen magnetycznych indukowanego prądem elektrycznym – badania tego typu będą kontynuowane podczas następnego pobytu badawczego.

Wybrane wyniki wykorzystane zostały do prezentacji na konferencji międzynarodowych (prezentacje typu: „oral") oraz publikacji.

Projekty badawcze NCN „Beethoven Life”

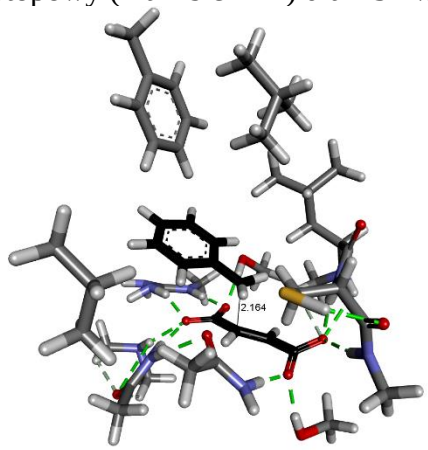
1. Struktura i funkcja enzymów glicynowo-rodnikowych katalizujących addycję do fumaranu: biochemia, modelowanie i zastosowanie

Projekt badawczy „BEETHOVEN LIFE" NCN nr 2018/31/F/NZ1/01856 [2020-2023]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec)

Celem projektu jest przebadanie biochemii rodnikowych enzymów glicynowych katalizujących addycję do fumaranu (tj. enzymów FAE – fumarate adding enzymes). Prototypowym przedstawicielem enzymów z tej klasy jest syntaza benzoiloboursztynianowa (BSS) z *Thaurea aromatica*, katalizująca addycję toluenu do fumaranu, w wyniku czego powstaje (*R*)-benzoiloboursztynian.

W drugim roku realizacji projektu skupiono się na opracowaniu modeli homologicznych dla szeregu enzymów FAE uzyskując modele BSS z *Aromatoleum toluolicum* szczep T, *A. aromaticum* szczep EbN1, *Tauera aromatica* szczep K172 oraz sytnazy naftyl-2-metylo-bursztynianowej (NMS) ze szczepów *NaphS2 i NaphS6, oraz T. aromatica K172.* Kontynuowano również symulacje dla podstawowego modelu BSS z *T. aromatica* szczep T1 i jego mutacji (I617V, R508K) z różnymi substratami (w szczególności ksylenami i 3-acetyloakrylanem). Analiza odległości grupy metylowej od atomu siarki w cysteinie pozwoliła przebadać prawdopodobieństwo zajścia aktywacji substratu. Zidentyfikowano również potencjalne interakcje odpowiadające za selektywność substratową BSS z T1. Uzyskane wyniki zostały częściowo opublikowane w ACS Catalysis.

Ponadto dokończono modelowanie metoda klasterową mechanizmu reakcji dla zdeprotonowanego fumaranu. Uzyskany profil energetyczny wskazuje, że etapem limitującym jest utworzenie wiązania C-C (TS2). W etapie tym zaobserwowaliśmy kinetyczną preferencję do ataku na tzw dystalny atom węgla fumaranu (Fig. 1, TS2a – 60.9 kJ/mol) względem ataku na atom proksymalny względem rodnikowej cysteiny (TS2b – 85.8 kJ/mol) atom węgla podwójnego wiązania fumaranu. Atak na atom dystalny wraz z selektywnym wiązaniem fumaranu zapewnia powstanie produktu o konfiguracji R. Ponadto ścieżka B charakteryzuje się zbyt wysoką energię etapu wygaszania rodnika (TS3b – 240.0 kJ/mol) aby mogła zachodzić. Obliczony kinetyczny efekt izotopowy (intrinsic KIE) dla TS1 wynosi 7.7, dla TS2a 2.0, a dla TS2b 2.2.



Rys. 1. TS2a dla modelu klasterowego. Atak na dystalny atom C wiązania podwójnego fumaranu; zielone linie – wiązania wodorowe.

Prace eksperymentalne prowadzono zarówno w laboratorium IKiFP PAN jak i w Marburgu, w grupie prof. J. Heidera. Opracowano metody analityczne dla analizy aktywności reakcji syntezy benzoiloboursztynaniu (a więc proces ekstrakcji ciecz-ciecz lub SPE, detekcji kwasu benzoiloboursztynianowego oraz fumaranu metodą LC-ESI(-)-MS/MS oraz chromatografii chiralnej w fazie normalnej) oraz metody uzyskiwania mutantów BSS, oczyszczania BSS w warunkach beztlenowych w oparciu o chromatografię powinowactwa Strep-Tag® prowadzoną w warunkach beztlenowych. Potwierdzono aktywność BSS typu dzikiego oraz mutanta Gln707Glu na podstawie reakcji przeprowadzonej z ekstraktem komórkowym i analizy chromatograficznej, wykazując neutralność tej mutacji względem aktywności enzymatycznej.

Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry”

1. SolarMethaChem: Procesy wywołane światłem słonecznym dla fotochemicznej konwersji metanu

Projekt badawczy „Solar-Driven Chemistry" NCN nr 2019/01/Y/ST4/00024 [2020-2023]
(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

Celami projektu projektu SolarMethaChem są: *i)* nanoinżynieria nowych wydajnych materiałów do wydajnego utleniającego sprzęgania metanu pod wpływem światła, *ii)* identyfikacja mechanizmów reakcji sprzęgania metanu oraz *iii)* optymalizacja reaktora fotochemicznego i warunków pracy. Grupa z IKiFP PAN odpowiada za badania teoretyczne w projekcie, które obejmują zarówno zaproponowanie modeli układów fotokatalitycznych i zbadanie ich struktury elektronowej, jak i określenie mechanizmu sprzęgania metanu do etanu.

W roku 2021 realizowano dwa zadania badawcze:

1) Wyznaczono strukturę układu $Ag^+@TiO_2$. Jon Ag^+ umieszczony został w 12 strukturalnie różnych pozycjach na powierzchni nanokryształu TiO_2 o pokroju bipiramidy tetragonalnej. Dla każdej ze struktur przeprowadzono optymalizację geometrii i wyznaczono strukturę elektronową stosując metodę DFT:PBE+D3/def2-TZVP. Stwierdzono, że Jon Ag^+ najbardziej stabilizowany jest na krawędzi nanokryształu. Orbitale jonu Ag^+ lokują się w pobliżu pasma walencyjnego TiO_2. Wprowadzenie jonu Ag^+ powoduje zmniejszenie rozmiaru przerwy wzbronionej kryształu, w zależności od jego pozycji, od 2.41 eV dla badanego kryształu TiO_2 do 0.68 - 1.30 eV dla układu $Ag^+@TiO_2$.

2) Grupy doświadczalne zaproponowały nowy układ, $Au@TiO_2$, jako efektywny katalizator do sprzęgania metanu w obecności tlenu. Obliczenia DFT pozwoliły wskazać najbardziej prawdopodobne miejsce aktywacji metanu. W tym celu skonstruowano modele poszczególnych fragmentów układu: klaster Au_6, klaster Au_6^- (powstały na skutek transferu elektronu z TiO_2 pod wpływem adsorpcji promieniowania), fragment dwutlenku tytanu oraz model obejmujący styk dwóch faz – $Au_6@TiO_2$. Obliczono energie adsorpcji metanu na poszczególnych układach (patrz Tabela poniżej) i stwierdzono, że metan preferencyjnie wiąże się na styku dwóch faz – nanocząstki złota i dwutlenku tytanu.

Tabela. Energia adsorpcji metanu na fragmentach katalizatora $Au@TiO_2$. Obliczenia DFT:BP/def2-TZVP.

Układ:	Au_6	Au_6^-	TiO_2	$Au_6@TiO_2$
Energia adsorpcji [kJ/mol]	-23.7	-22.5	-20.2	-35.1

Projekty badawcze NCN „GRIEG”

1. Craquelure – Model obrazów ze spękaniami wspierający ustalenie racjonalnych wytycznych środowiskowych w muzeach

Projekt badawczy „GRIEG" NCN nr 2019/34/H/HS2/00581 [2020-2023]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz)

W roku 2021 zespół badawczy instytutu realizujący projekt GRIEG Craquelure koncentrował się na opracowaniu bazy właściwości historycznych materiałów artystycznych, używanych w obrazach, oraz materiałów współczesnych stosowanych do konsolidacji warstw malarskich. W tym celu wybrano reprezentatywne materiały do testów laboratoryjnych wspólnie z dr Aleksandrą Holą, konserwatorem malarstwa krakowskiej Akademii Sztuk Pięknych, które objęły trzy rodzaje tempery żółtkowej z bielę ołowiową, żółtym ugrem oraz azurytem jako pigmentami, temperą klejową z azurytem jako pigmentem. Dla każdego pigmentu zoptymalizowano opracowane wcześniej receptury proporcje na podstawie kryteriów mechanicznych oraz oceny wizualnej próbek po kilkumiesięcznym okresie starzenia. Następnie otrzymany surowy materiał poddano obróbce mechanicznej by otrzymać próbki o zadanym przekroju umożliwiające wykonanie badań mechanicznych w uniwersalnej maszynie wytrzymałościowej. W oparciu o wykonane próbki wyznaczono izotermy sorpcji pary wodnej, izotermy pęcznienia i skurczu oraz moduły sztywności, krytyczne odkształcenie, przy którym próbki ulegały zerwaniu dla czterech zakresów wilgotności względnej (30%, 50%, 75 % oraz 90%). Dla części próbek wyznaczono moduły zachowania oraz parametr tanDelta wykorzystując dynamiczny analizator mechaniczny. Dodatkowo, wykonano próbki naturalnych i syntetycznych materiałów konserwatorskich – impregnatów Lascaux 4176 oraz BEVA 371b i werniksów Regalrez 1094 oraz damarowego.

Równolegle testowano i udoskonalano trójwymiarowy model obrazu na desce z rozwiniętą siatką spękań do symulacji powstawania nowych pęknięć przy obciążeniach wilgotnościowych. W modelu przyjęto dwa typowe mody obciążenia. Jeden, jednoosiowy generowany przez odpowiedź wilgotnościową drewnianego podobrazia, drugi izotropowy związany z skurczem wysychania (ang. annealing). Rozważono również mod mieszany, w którym obecne są oba mody. Zoptymalizowany model 3D posłużył do wyznaczenia krytycznych odległości pomiędzy spękaniami w kierunku wzdłuż i w poprzek włókien drewna poniżej, których nie powstaną nowe pęknięcia. Model pozwolił wytłumaczyć pęknięcia równoległe do włókien drewna oraz pęknięcia o kształcie kwadratu obserwowane w rzeczywistych obrazach oraz ich superpozycję. Model nie pozwolił na wyjaśnienie spękań prostopadłych do włókien drewna.

W ramach projektu opracowywane są również algorytmy przetwarzania obrazu w celu wyodrębnienia spękań z wybranych fragmentów obrazów. Zastosowano między innymi binaryzację, metody przerzedzenia oraz algorytmy filtrowania wyszukujące zbiory sąsiednich pikseli, dla których intensywność przyjmuje ekstrema lokalne w kierunku krzywizny głównej pozwalające na wyodrębnienie linii pęknięć na jednorodnym tle. Opracowane algorytmy wykorzystano do scharakteryzowania siatki spękań obrazu na desce powstałej w wyniku cykli wilgotnościowych w komorze klimatycznej. Pozwoliły one także na charakterystykę statystyczną powstałych spękań tj. średnia długość pęknięć, orientacja każdego pęknięcia czy kierunkowa średnia gęstość spękań. Przeprowadzono również obliczenia numeryczne bazując na wybranych rzeczywistych dziełach sztuki z rozwiniętą siatką spękań.

2. Teranostyczne nanonośniki dla dostarczania leków w chorobach centralnego układu nerwowego

Projekt badawczy „GRIEG" NCN nr 2019/34/H/ST5/00578 [2021-2024]
(kierownik projektu: prof. dr. hab. 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 molekularnych mechanizmów procesów, w których ulegają uszkodzeniu funkcje neuronów i metod zapobiegania im, tylko niewielka liczba leków jest wykorzystywana w zastosowaniach klinicznych, a ich skuteczność w leczeniu udaru mózgu i chorób neurodegeneracyjnych nie jest zadowalająca. Jednym z głównych ograniczeń w dotychczasowym leczeniu jest nieefektywne dostarczanie leków o działaniu neuroprotekcyjnym do uszkodzonej części mózgu, jak również trudność w ocenie czy lek jest dobrze adresowany czyli, że dociera do miejsca przeznaczenia. Teranostyka jest nową dziedziną medycyny polegająca na połączeniu funkcji terapeutycznej i diagnostycznej w jednym preparacie. Zastosowanie nanotechnologii w teranostyce pozwala na opracowanie nośników leków, które jednocześnie dostarcza substancję leczniczą i będą pełnić funkcję diagnostyczną.

Głównym celem projektu jest opracowanie nowej strategii dostarczania leków o działaniu neuroprotekcyjnym przy pomocy nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, nie wykazujących negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie, a których obecność w danym organie może zostać wykryta poprzez obrazowanie metodą rezonansu jądrowego (MRI). Projekt jest realizowany przez międzynarodowe konsorcjum naukowe złożone z Instytutu Katalizy i Fizykochemii im. Jerzego Habera PAN, Instytutu Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytutu Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN ze strony polskiej oraz SINTEF Oslo i Szpitalu Uniwersyteckiego w Oslo ze strony norweskiej.

W trakcie realizacji projektu zastosujemy różne metodologie enkapsulacji wybranych aktywnych substancji o działaniu neuroprotekcyjnym wraz ze znacznikami kontrastowymi dla obrazowania metodami fluorescencyjną oraz MRI. Wymagany rozmiar nanonośników nie powinien przekraczać 150 nm. Nanonośniki powinny charakteryzować się brakiem toksyczności, mają być niewidoczne dla układu immunologicznego, przenikać barierę krew-mózg oraz umożliwiać ich precyzyjną lokalizację w organizmie. Nanonośniki fluorescencyjne będą użyte w testach komórkowych in vitro efektywności działania zamkniętych w nich leków oraz do lokalizacji ex-vivo, natomiast nanonośniki znakowane czynnikami kontrastowymi MRI do obserwacji in vivo na modelach zwierzęcych. Ostatecznym celem projektu jest próba opracowania nowych systemów podawania leków, które mogą w przyszłości znaleźć zastosowanie przy leczeniu chorób neurodegeneracyjnych np. choroby Alzheimera, Parkinsona lub schizofrenii.

Projekty badawcze NCN „Miniatura”

1. Poszukiwanie nowych ketosteroidowych dehydrogenaz bakteryjnych katalizujących utleniające odwodornienie steroidów

Projekt badawczy „MINIATURA" NCN nr 2018/02/X/ST4/01963 [2018-2021]
(kierownik projektu: dr Agnieszka M. Wojtkiewicz)

Celem projektu była identyfikacja roli fizjologicznej potencjalnych FAD-zależnych dehydrogenaz 3-ketosteroidowych (KstD), dwóch ze *Sterolibacterium denitrificans* Chol-1S i trzech z *Pseudomonas putida* KT2440, a w szczególności odpowiedź na pytania: i) czy ekspresja genów kodujące sekwencje FAD-zależnych enzymów daje katalizatory o aktywności KstD; ii) jaka jest regioselektywność reakcji (Δ1 czy Δ4) iii) czy substratami reakcji są tylko 4-pierścieniowe ketosteroidy nierozgałęzione przy C17 jak androstenodion, czy także rozgałęzione przy C17 jak cholestenon czy 3-ketopetromyzonol, czy także układy 2- i 5-pierścieniowe; iv) czy badane enzymy różnią się optimum pH oraz preferencją względem stosowanego akceptora elektronowego.

W 2021 roku przygotowano raport końcowy z przebiegu projektu oraz uzyskanych rezultatów. Najważniejszym wynikiem projektu było otrzymanie funkcjonalnego białka AcmB2 ze *Sterolibacterium denitrificans* Chol-1S dla którego dokonano wstępnej charakterystyki odpowiadając na powyższe pytania. Zaskakującym wynikiem było wykazanie aktywności dla układów 5-pierścieniowych.

Niestety pomimo wielu prób, dla drugiego potencjalnego enzymu KstD ze *Sterolibacterium denitrificans* Chol-1S nie powiódł się proces wklonowania plazmidu ze wstawką genu kodującego enzym do bakterii, tym samy dla tego enzymu nie otrzymano żadnych wyników. Z kolei dla trzech białek z *Pseudomonas putida* KT2440 nie opracowano efektywnego systemu nadekspresji, otrzymując w przeważającej większości nierozpuszczalne, a co za tym idzie niefunkcjonalne białko. Dla trzech enzymów KstD z *Pseudomonas putida* KT2440 tylko w jednym eksperymencie potwierdzono aktywność w kierunku 1,2-dehydrogenacji dla androstenodionu oraz brak aktywności dla cholest-4-en-3-onu.

Wyniki niniejszego projektu stały się podstawą do przygotowania wniosków patentowych, publikacji naukowej oraz wstępem do napisania kolejnego projektu na dalsze badania.

2. Ultradźwiękowa synteza zeolitów o strukturze fojazytu jako katalizatorów do reakcji dekarbonylacji furfuralu do furanu

Projekt badawczy „MINIATURA" NCN nr 2019/03/X/ST4/00149 [2019-2021]
(kierownik projektu: dr inż. Łukasz Kuterasiński)

Spośród szeregu metod otrzymywania zeolitów, synteza sonochemiczna wydaje się być alternatywą dla klasycznych metod syntez ze względu na możliwe skrócenie czasu procesu oraz złagodzenie warunków temperaturowych i ciśnieniowych. Zastosowanie tej metody w dalszej perspektywie prowadzić mogłoby do ograniczenia lub nawet eliminacji wykorzystania kosztownych (oraz często szkodliwych) odczynników. Takie rozwiązanie prowadziłoby do obniżenia kosztów syntezy zeolitów, wpisując się jednocześnie w nurt zielonej chemii.

W obecnych badaniach wykonano próby syntezy zeolitów o strukturze fojazytu metodą sonochemiczną w celu ich dalszego zastosowania jako katalizatorów w reakcji otrzymywania furanu z furfuralu. W nawiązaniu do dobrze znanej syntezy hydrotermalnej zeolitów, szczególnym i innowacyjnym aspektem jest całkowite zastąpienie metody hydrotermalnej sonochemiczną. Wybór fojazytu spośród ponad 250 struktur zeolitowych wynikał z faktu, iż zeolit o tej strukturze jest jednym z najczęściej wykorzystywanych katalizatorów w przemyśle chemicznym. Dla otrzymanych układów określono takie parametry jak: czas potrzebny do wykrystalizowania zeolitu o strukturze fojazytu w zależności od warunków sonikacji, krystaliczność, strukturę, morfologię oraz kwasowość.

Otrzymane wyniki badań wstępnych wskazują, że synteza zeolitu o strukturze fojazytu metodą ultradźwiękową nie jest niemożliwa. Niemniej, otrzymany produkt (po 8 godzinach działania ultradźwięków na żel zeolitowy) nie jest w pełni wykrystalizowany oraz ma szklistą i twardą postać. Potrzebne są dalsze badania. Wykazano również, że zastosowanie ultradźwięków do starzenia żelu zeolitowego bezpośrednio przed syntezą hydrotermalną preparatów zeolitowych o strukturze fojazytu prowadzi do powstawania układów zawierających głównie mezopory, których rozmiar zwiększa się wraz z czasem ekspozycji żelu na fale ultradźwiękowe. Wskazuje to na możliwość stosowania techniki sonochemicznej jako narzędzia do otrzymywania układów mezoporowatych, bez konieczności stosowania dodatkowej obróbki posyntezowej mikroporowatych układów zeolitowych z użyciem często drogich i toksycznych odczynników desilikujących.

Badania kwasowości metodą sorpcji amoniaku i tlenku węgla w podczerwieni wykazały, że zastosowanie ultradźwięków w syntezie i modyfikacji zeolitów o strukturze fojazytu doprowadziło do obniżenia stężenia centrów kwasowych zarówno Brønsteda jak i Lewisa. Z analizy widm w podczerwieni preparatów bezpośrednio po aktywacji w temperaturze 400 ^{o}C (przed podaniem cząsteczki-sondy) wynika, że obecne centra kwasowe protonowe mają postać głównie mostkowych grup hydroksylowych (gniazd hydroksylowych) o niskiej mocy kwasowej. Badania sorpcji CO nie pozwoliły oszacować mocy kwasowej obecnych grup OH ze względu na bardzo niską moc kwasową mostkowych grup OH. Obecność gniazd hydroksyli wynika z mezoporowatej struktury zeolitów otrzymanych z zastosowaniem ultradźwięków.

Wykonano również testy katalityczne w reakcji dekarbonylacji furfuralu do furanu dla zeolitów o strukturze fojazytu. Wszystkie przebadane preparaty były nieaktywne w testowanej reakcji, co prawdopodobnie związane było z niską mocą kwasową centrów protonowych w badanych katalizatorach. Dla porównania, zbadano handlowy zeolit o strukturze fojazytu, o podwyższonym module krzemowym Si/Al=31 oraz o mostkowych centrach kwasowych typu Brønsteda Si-OH-Al i wysokiej mocy kwasowej 355 cm^{-1}. W 300 ^{o}C, konwersja furfuralu wyniosła 33%, zaś wydajność furanu 16%. Wszystkie przebadane katalizatory ulegały koksowaniu.

3. Badania wstępne wpływu domieszkowania stopów magnezu pierwiastkami ziem rzadkich na mechanizmy korozji i jej przeciwdziałania przez inhibitory nieorganiczne

Projekt badawczy "Miniatura" NCN 2019/03/X/ST4/00749 [2019-2021]
(kierownik projektu: dr Dzmitry Kharytonau)

Głównym celem projektu było zbadanie wpływu mikrostruktury stopów magnezu domieszkowanych metalami ziem rzadkich (QE22, ZRE1 i WE43) na mechanizmy hamowania korozji przez anionowe (wanadiany, molibdeniany) i kationowe (sole metali ziem rzadkich) inhibitory w skali makro i mikro.

W 2021 r. zbadany zostali inhibitory kationowy. Jako inhibitor kationowy został zbadany azotan ceru (III) $Ce(NO_3)_3$. Podczas badań elektrochemicznych ustalono, że warstwa ochronna inhibitora na powierzchni stopów Mg tworzy się zbyt wolno, co nie pozwala na skuteczną ochronę antykorozyjną. W celu przyspieszenia procesu zastosowano utleniacz H_2O_2 (10 mL 30% H_2O_2/L), co pozwoliło osiągnąć stopień inhibicji korozji na poziomie 70–80%. Badania mechanizmu działania związków ceru wykazały również występowanie podobnego mechanizmu. Warstwa ochronna składa się z związków Ce(III)/Ce(IV).

Podsumowując, w trakcie badań wstępnych realizowanych w projekcie, zbadana została struktura stopów Mg QE22, ZRE1 i WE43, mechanizmy korozji oraz proces jej hamowania przez inhibitory nieorganiczne. Wyniki te mają istotne znaczenie dla zrozumienia mechanizmów działania inhibitorów utleniających i dalszego rozwoju ochrony antykorozyjnej stopów Mg.

4. 'Confinement effect' - 5-fluorouracyl w mezoporach

Projekt badawczy "Miniatura" NCN 2019/03/X/ST5/01756 [2019-2021]
(kierownik projektu: dr Mariusz Gackowski)

Do przeprowadzenia działania naukowego użyto wielu mezoporowatych materiałów na bazie krzemionki: SBA-15, MCM-41 oraz mezoporowate zeolity o różnej topologii (ZSM-5, Y, BEA). Wpływ obecności glinu w materiałach został również zbadany poprzez użycie preparatu MCM-41 po aluminacji (Al-MCM-41) oraz mezoporowatych zeolitów wypreparowanych z materiałów o różnym stosunku Si/Al (zeolit ZSM-5 o Si/Al = 11 i Si/Al = 40). Po ustaleniu optymalnych warunków nanoszenia, wprowadzono 5-fluorouracyl do wszystkich nośników. Próbki scharakteryzowano metodami: porozymetria (N_2 BET), spektroskopia w podczerwieni (FT-IR), skanningowa mikroskopia elektronowa (SEM), termograwimetria (TG), dyfraktometria rentgenowska (XRD), spektroskopia NMR w ciele stałym (MAS NMR). Dla wybranych próbek przeprowadzono testy wymywania leku do SBF (simulated body fluid) przeprowadzone w 37°C, kontrolując stężenie leku w SBF przy użyciu spektroskopii UV-VIS. Do wprowadzenia leku skorzystano z wody destylowanej jako rozpuszczalnika oraz stężenia 10 mg/ml 5-fluorouracylu. Zdjęcia SEM wyjściowych materiałów porowatych pokazują, że charakteryzują się one różną morfologią i wielkością krystalitów. W badaniach XRD tylko w 2 próbkach (SBA-15 oraz mezoporowaty zeolit BEA) jest widoczny charakterystyczny refleks pochodzący od kryształów 5-flurouracylu przy 28.6 [2 theta]. Oznacza to, że w większości przypadków lek jest obecny w materiale w innej formie niż krystaliczna. TG pokazuje obecność fazy organicznej, jednak jedynie w ilościach od paru do parunastu % wagowych. Widma FT-IR pokazują słabe sygnały charakterystyczne dla 5-fluorouracylu widoczne zwłaszcza w zakresie 1650 – 1800 cm^{-1}, gdzie występują drgania od grup C=C oraz C=O. Drgania rozciągające C=C są przesunięte w stosunku do czystego 5-fluorouracylu nie wprowadzonego do mezoporowatych materiałów o ponad 30 cm^{-1}. Badania N_2 BET pokazują, że powierzchnia właściwa, objętość mezoporów, powierzchnia mikroporów zmniejszają się po wprowadzeniu 5-fluorouracylu do materiałów porowatych. Oznacza to, że cząsteczki leku są obecne zarówno w mikroporach, jak i mezoporach badanych materiałów. Widma ^{13}C CP MAS NMR pokazują 4 charakterystyczne sygnały w zakresie 120-170 ppm. Dla mezoporowatego zeolitu ZSM-5 widma ^{13}C CP MAS pokazują sygnały pochodzące od węgli C=O oraz C=C są przesunięte w stosunku do widm rejestrowanych dla czystego 5-fluorouracylu. Dwuwymiarowe widmo ^{1}H-^{1}H NOESY pokazało koherencję między protonami od 5-fluorouracylu a grupami Si-OH-Al w zeolicie, co potwierdza wprowadzenie substancji aktywnej do mikroporów. Widma ^{1}H MAS NMR pokazują charakterystyczne sygnały od fazy organicznej przy 7 i 10 ppm. Jednak w większości przypadków są one niskiej intensywności i nakładają się z intensywnym sygnałem od wody. W niektórych przypadkach (SBA-15, mezoporowaty zeolit Y) zaobserwowano wąskie sygnały od 5-FU. Może to oznaczać wysoką mobilność tych molekuł, być może związaną z obecnością wody w materiałach. Przeprowadzono eksperymenty mające na celu ustalenie wpływu wody na widma 5-FU w mezoporach. Widma ^{1}H MAS NMR preparatów odgazowanych pokazują szersze sygnały 5-FU niż w formie uwodnionej. Przeprowadzono również uwodnienia tych preparatów przez trzymanie w eksykatorze z nasyconym $Mg(NO_3)_2$ przez 18 godzin. Takie uwodnione preparaty wskazują jeszcze węższe sygnały od fazy organicznej dla preparatów SBA-15 oraz mezoporowatego zeolitu Y. To może wskazywać, że woda obecna w materiałach wpływa na mobilność fazy organicznej w mezoporach.

Wybrane próbki (na osnowie SBA-15 i MCM-41 oraz mezoporowatych zeolitów ZSM-5 i Y) zostały poddane eksperymentom wymywania leku z nośnika. Zbadane próbki charakteryzują się bardzo szybkim wymywaniem, tj. plateau stężenia 5-fluorouracylu w SBF jest osiągane już po 15 minutach wymywania.

Projekty badawcze NCBR „EIG CONCERT-JAPAN”

1. Wielofunkcyjne, wysokosprawne materiały: porowate materiały kompozytowe do procesów membranowych

Projekt badawczy „EIG CONCERT-JAPAN" NCBR nr /1/2019 [2019-2023]
(kierownik projektu: dr hab. inż. Aleksandra Pacuła)

Celem przeprowadzonych badań była charakterystyka właściwości fizykochemicznych metodami XPS, TEM, XRD oraz fotokatalitycznych kompozytów typu metal-TiO_2-zeolit.

Do badań wytypowano serię próbek (Ag-TiO_2, Ag-TiO_2-ZY, Pd-TiO_2, Pd-TiO_2-ZY) otrzymanych w wyniku osadzenia nanocząstek metalu (Ag lub Pd) na komercyjnym TiO_2 (Sigma-Aldrich, "aeroxide® P25") lub na fizycznej mieszaninie TiO_2 z komercyjnym zeolitem Y (WAKO) zawierającej 5 wt. % zeolitu Y – sodowej formy. Nominalne stężenie naniesionego w postaci nanocząstek metalu (Ag lub Pd) w preparatach wynosiło 0.05 wt. % w przypadku Ag lub 1 wt. % w przypadku Pd.

Analiza składu powierzchniowego kompozytów metodą XPS potwierdziła obecność srebra na poziomie 0.08 i 0.15 wt. % w próbkach: Ag-TiO_2 i Ag-TiO_2-ZY, a w przypadku próbek: Pd-TiO_2 i Pd-TiO_2-ZY obecność palladu na poziomie 0.4 i 1.2 wt. %.

Analiza obrazów TEM pozwoliła opisać morfologię ziaren składników kompozytów i ich wzajemnie rozmieszczenie. Ziarna zeolitu Y o rozmiarach mikrometrycznych (~ 6 μm) były pokryte nanocząstkami TiO_2 (~ 21 nm). Stosując obrazowanie TEM i analizę EDX udało się potwierdzić obecność nanocząstek Pd w próbkach: Pd-TiO_2 i Pd-TiO_2-ZY, które preferencyjnie lokowały się na ziarnach TiO_2 i tworzyły mniejsze lub większe skupiska (klastery). Natomiast ze względu na niskie stężenie srebra w próbkach: Ag-TiO_2 i Ag-TiO_2-ZY, nie udało się wykryć i zlokalizować nanocząstek Ag.

Analiza obrazów dyfrakcyjnych (XRD) TiO_2 (Sigma-Aldrich) i TiO_2 (Evonik) metodą Rietvelda z zastosowaniem oprogramowania TOPAS pozwoliła na oszacowanie składu fazowego obu preparatów, który był następujący: TiO_2 (Sigma-Aldrich) – anataz (79 %) i rutyl (21 %), TiO_2 (Evonik) – anataz (76 %) i rutyl (24 %). Komercyjne preparaty miały zbliżony skład fazowy i tym samym charakteryzowały się podobnymi właściwościami fotokatalitycznymi potwierdzonymi w reakcji degradacji barwnika: oranżu metylowego (z użyciem lampy UV z emisją promieniowania w zakresie długości fali: 365 – 367.5 nm). Stopień degradacji barwnika w obecności TiO_2 wynosił: 36 – 40 % po 1 godzinie naświetlania, 70 – 71 % a po 2 godzinach naświetlania. Stopień adsorpcji barwnika (po 2 godzinach mieszania w ciemności) na obu preparatach TiO_2 był zbliżony i wynosił 34 – 37 %.

Właściwości fotokatalityczne kompozytów proszkowych zostały sprawdzone w reakcji degradacji (z użyciem 4 lamp UV-A z emisją promieniowania o maksymalnej długości fali: 365 nm) środka powierzchniowo czynnego - dodecylobenzenosulfonianu sodu (SDBS) i kwasu dichlorooctowego (DCA) w obecności Ag-TiO_2, Ag-TiO_2-ZY, Pd-TiO_2, Pd-TiO_2-ZY, TiO_2 i TiO_2-ZY. Degradacja SDBS w obecności TiO_2 lub TiO_2-ZY wynosiła 80 i 72 % po 3 godzinach naświetlania. Dodatek Ag do TiO_2 lub TiO_2-ZY spowodował zmniejszenie degradacji, która wynosiła 60 % dla Ag-TiO_2 i Ag-TiO_2-ZY. Większe stężenie Pd w Pd-TiO_2 lub Pd-TiO_2-ZY spowodowało większą redukcję degradacji, która wynosiła odpowiednio 40 lub 35 %. Degradacja DCA w obecności Ag-TiO_2 lub Ag-TiO_2-ZY lub TiO_2-ZY była porównywalna do tej w obecności TiO_2 i wynosiła 100 % po 1½ godziny naświetlania. W obecności Pd-TiO_2 i Pd-TiO_2-ZY stopień degradacji DCA był mniejszy po takim samym czasie naświetlania tj. 1½ godziny aż w końcu (po 2 godzinach) osiągnął 100 % dla Pd-TiO_2 i 85 % dla Pd-TiO_2-ZY. Stopień adsorpcji SDBS lub DCA (po ½ godziny mieszania w ciemności) na wszystkich preparatach był zbliżony i wynosił < 10 %.

Okazało się, że dodatek zeolitu Y jak również osadzenie nanocząstek metalu a zwłaszcza Pd na TiO_2 zmniejsza wydajność degradacji SDBS lub DCA w porównaniu z czystym TiO_2.

Projekty NCBR „TechMatStrateg”

1. Technologia biorafinacji olejów roślinnych do wytwarzania zaawansowanych materiałów kompozytowych

Projekt badawczy „TECHMATSTRATEG" NCBR nr TECHMATSTRATEG2/407507/1/NCBR/2019 [2019-2022]
(kierownik projektu: Maciej Guzik)

Zadanie 1

1. Fermentacje prowadzące do aPHA

Celem zadania jest produkcja amorficznego polimeru mclPHA wytwarzanego przez bakterie *Psedomonas putida* CA3. W okresie sprawozdawczym z sukcesem przeskalowano proces do 30L a następnie do skali 200L. Przeprowadzono hodowle mające za zadanie wyprodukowanie znaczących ilości polimeru, który przekazano Konsorcjantom w celu umożliwienia zaplanowanych badań.

2. Fermentacje prowadzące do PHB

Celem zadania jest produkcja krystalicznego polimeru PHB wytwarzanego przez bakterie *Z. denitirficans MW1*. W okresie sprawozdawczym z sukcesem przeskalowano proces do 30L a następnie do skali 200L. Przeprowadzono hodowle mające za zadanie wyprodukowanie znaczących ilości polimeru, który przekazano Konsorcjantom w celu umożliwienia zaplanowanych badań.

3. Opracowanie przędzonych na mokro materiałów polimerowo kompozytowych

W okresie sprawozdawczym opracowano metodologię przędzenia na mokro pianek otrzymywanych przez strącanie chloroformowego roztworu PHB w łaźni metanolowej. Opracowano metodologie syntezy pianek zawierających substancje aktywna – diklofenak, jak i dodatek pyłu ceramicznego na bazie trójfosforanów wapnia.

4. Zagospodarowanie strumieni odpadowych

W okresie sprawozdawczym zakończono opracowanie metody chemicznej hydrolizy biomasy pofermentacyjnej. Rozpoczęto pilotażowe badania, w których hydrolizaty badane są pod kątem ich zastosowania jako nawozy dla hodowli roślin użytkowych.

Zadanie 2

W okresie sprawozdawczym zaadaptowano na potrzeby projektu halę na ul. Balickiej 100 w Krakowie, którą wyposażono w odpowiedni linie technologiczne. Zamontowano ruchome elementy prototypowej linii biorafinerii. Na terenie Instytutu rozpoczęto budowę docelowej obudowy dla prototypu.

Projekty NCBR „Program operacyjny Inteligentny Rozwój”

1. CULDIGI - Projekt zintegrowanego systemu cyfryzacji, katalogowania i dokumentacji dziedzictwa kulturowego (obrazów oraz artefaktów 2D)

Projekt badawczy „Program operacyjny Inteligentny Rozwój" NCBR nr POIR.04.01.04-00-0145/19 [2021-2023]
(kierownik projektu: dr hab. inż. Jakub Barbasz, dr Leszek Krzemień)

Celem tego projektu jest opracowanie pełnopowierzchniowego skanera, urządzenia, które skanuje z mikroskopijną rozdzielczością duże artefakty artystyczne, takie jak malowanie rysunków i dokumentów.

W 2021 roku zakończono wszystkie zaplanowane prace.

- Przetestowano możliwość fotografowania obiektów zabytkowych za pomocą ruchomej kamery. Testy przeprowadzono przesuwając kamerę w płaszczyźnie XY oraz wzdłuż osi Z.
- Wykazano, że możliwe jest uchwycenie ostrych i wysokiej jakości obrazów bez zatrzymywania kamery.
- Opracowano wymagania techniczne i niezbędną dokumentację do realizacji prototypu.
- Istniejący sprzęt IKIFP został przystosowany do przeprowadzenia niezbędnych testów.
- Do testów wyznaczono dwie metody oświetlenia, obie oparte na oświetleniu LED. Wstępne wyniki wskazują na brak istotnego wpływu metody oświetlenia na otrzymane wyniki.
- W trakcie badań określono parametry obrazu w skali MOS zgodnie z opisem w złożonym wniosku. W tym zakresie osiągnięto TLR 6.
- Przygotowano odpowiednie zestawy danych testowych do pracy nad opracowaniem algorytmów składania obrazów.
- Dokonano analizy potrzeb wydajnościowych komputerów wykorzystywanych do montażu zbieranych obrazów.
- Prowadzono prace nad analizą znanych algorytmów o funkcjonalności zbliżonej do wymaganej dla produktu finalnego.
- Prowadzono prace nad wykonaniem systemów do znajdowania tzw. „punktów kontrolnych" lub „punktów wspólnych" do pozycjonowania sekwencyjnie zbieranych obrazów w przestrzeni dwuwymiarowej, a potencjalnie również w przestrzeni 3D.
- W ramach prac projektowych wykonano symulacje sterowników silników wykorzystywanych do pozycjonowania kamer.
- Odbyły się również symulacje sterowników oświetlenia stosowanych do skrócenia czasu naświetlania.
- Zakończono prace nad dokumentacją wykonania poszczególnych elementów elektronicznych.

Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej

1. PROM Międzynarodowa wymiana stypendialna doktorantów i kadry akademickiej

Projekt NAWA PPI/PRO/2018/1/00006/U/001 PROM [2018-2023]
(kierownik projektu: prof. Tomasz Borowski)

Zgodnie z założeniami Projektu, na przełomie 2019/2020 przeprowadzono i rozstrzygnięto następujące konkursy o stypendia w ramach Programu PROM:

1. Konkurs o stypendia na sfinansowanie kosztów uczestnictwa w krótkich formach kształcenia za granicą (konferencja naukowa, szkoła naukowa, warsztaty naukowe, kursy naukowe, szkolenia naukowe) doktorantom IKiFP PAN,
2. Konkurs o stypendia na sfinansowanie kosztów krótkoterminowych staży w zagranicznych jednostkach badawczych doktorantom IKiFP PAN,
3. Konkurs o stypendia na sfinansowanie kosztów krótkoterminowych staży w zagranicznych jednostkach badawczych przedstawicielom kadry naukowej IKiFP PAN,
4. Konkurs o stypendia na sfinansowanie kosztów krótkoterminowych staży w IKiFP PAN doktorantom z zagranicy,
5. Konkurs o stypendia na sfinansowanie kosztów krótkoterminowych staży w IKiFP PAN przedstawicielom kadry naukowej z zagranicy.

W ramach wszystkich powyższych konkursów do Projektu zostało zakwalifikowanych 27 uczestników. Niestety ze względu na powracające okresowo fale pandemii COVID-19, duża część z planowanych wyjazdów i przyjazdów nie została jeszcze zrealizowana. W roku 2020 zrealizowano jedynie 2 staże pracowników zagranicznych w IKiFP PAN.
Natomiast w roku 2021:
- 2 doktorantki IKiFP PAN wzięły udział w konferencji zagranicznej;
- 1 przedstawiciel kadry naukowej IKIFP PAN odbył staż naukowy w jednostce zagranicznej;
- 1 doktorantka i 1 doktorant z zagranicznych jednostek naukowych zrealizowali staż naukowy w IKIFP PAN w Krakowie;
- 1 przedstawicielka kadry naukowej z zagranicy odbyła staż naukowy w IKiFP PAN.

Umowę z NAWA na realizację projektu przedłużono do końca marca 2023.

2. Program Polskie Powroty - CRAQUELURE

Projekt badawczy nr PPN/PPO/2018/1/00004/U/00001 [2018-2022]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz, wykonawcy: dr Mohammad Yaghoub Abdollahzadeh Jamalabadi, inż. Łukasz Berger)

Celem programu „Polskie powroty" i tym samym projektu CRAQUELURE jest stworzenie grupy projektowej prowadzącej badania nad opracowaniem fizycznego modelu warstw malarskich w obrazach w oparciu o środki finansowe pozyskane ze źródeł zewnętrznych oraz prowadzenie innych badań z obszaru ochrony dziedzictwa kultury. Dlatego trzeci rok realizacji projektu poświęcony był na dalsze składanie wniosków o finansowanie badań.

W okresie tym zostało złożonych kilka wniosków o finansowanie zewnętrzne do:

- Komisji Europejskiej "Data Science for Preventive Conservation – Doctoral Network" konkurs HORIZON-MSCA-DN-2021,
- Komisji Europejskiej "Sustainable conservation and climate control strategies for cellulose-based cultural heritage" konkurs HORIZON-CL2-2021-HERITAGE-01-01,
- Polskiej Akademii Nauk, "Time-dependant behaviour of historical wooden constructions and panel paintings" program Pasific 1,
- Polskiej Akademii Nauk, "Time-dependant behaviour of historical wooden constructions and panel paintings" program Pasific 2.

Na początku roku 2021 do grupy projektowej dołączył inż. Łukasz Berger, informatyk, którego zadaniem było rozwinięcie narzędzia HERIe. W ramach prac, zaimplementowano moduł degradacji chemicznej pozwalający na obliczanie względnego czasu życia obiektów podatnych na proces degradacji, takich jak papier, drewno, tkaniny i tworzywa sztuczne, który obliczany jest w stosunku do warunków referencyjnych – 20°C i 50% wilgotności względnej. Moduł oparty jest o trzy funkcje degradacji opracowane dla kwaśnego papieru, octanu celulozy oraz ogólnej grupy materiałów. Ponadto, moduł pozwala obliczać czas życia materiałów wrażliwych wyrażany w latach dla octanu celulozy i kwaśnego papieru. Następnym zaimplementowanym modułem jest moduł „pożarowy" pozwalający obliczać przewidywaną utratę wartości zbioru na skutek pożaru w zależności od typu i konstrukcji budynku, w którym jest on przechowywany, wrażliwości materiału na działanie wody i ognia oraz ilości obiektów znajdujących się w gablotach. Zaimplementowano także moduł do obliczeń stężenia zanieczyszczeń gazowych w pomieszczeniach w oparciu o stężenia tych zanieczyszczeń na zewnątrz w zależności o typu materiału, z którego wykonane jest pomieszczenie oraz krotności wymiany powietrza wewnętrznego z powietrzem zewnętrznym. Wszystkie moduły zostały przetestowane, dogłębnie sprawdzone a ich działanie zoptymalizowane.

Równolegle testowano i udoskonalano trójwymiarowy model obrazu na desce z rozwiniętą siatką spękań do symulacji powstawania nowych pęknięć przy obciążeniach wilgotnościowych. W modelu przyjęto dwa typowe mody obciążenia. Jeden, jednoosiowy generowany przez odpowiedź wilgotnościową drewnianego podobrazia, drugi izotropowy związany z skurczem wysychania (ang. annealing). Rozważono również mod mieszany, w którym obecne są oba mody. Zoptymalizowany model 3D posłużył do wyznaczenia krytycznych odległości pomiędzy spękaniami w kierunku wzdłuż i w poprzek włókien drewna poniżej, których nie powstaną nowe pęknięcia. Model pozwolił wytłumaczyć pęknięcia równoległe do włókien drewna oraz pęknięcia o kształcie kwadratu obserwowane w rzeczywistych obrazach oraz ich superpozycję. Model nie pozwolił na wyjaśnienie spękań prostopadłych do włókien drewna.

3. Selektywne utlenianie metanu do metanolu na katalizatorach zeolitowych z wprowadzonymi jonami metali

Projekt badawczy NAWA PPN/BIL/2018/1/00069 [2019-2021]
(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

Celem niniejszego projektu współpracy bilateralnej pomiędzy Instytutem Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN oraz Instytutu Chemii Fizycznej im. J. Heyrovskýego CAS jest wprowadzenie aktywnych jonów metali (Fe, Mn) do matryc zeolitowych o strukturze ferierytu (FER) i zeolitu beta (*BEA) oraz wytworzenie na nich grup okso (M=O, gdzie M = Fe, Mn) tak, aby otrzymać katalizatory aktywne w reakcji selektywnego utleniania CH_4 do CH_3OH przez N_2O.

Prowadzono dalsze testy katalityczne badanych układów w reakcji utleniającego odwodornienia propanu w zakresie temperatur 100-300 °C.

Przeprowadzono syntezę katalizatorów, w których do matrycy *BEA wprowadzono jony Fe i Mn oraz wykonano ich charakterystykę fizykochemiczną. Stwierdzono, że specjacja wprowadzonych metali przejściowych zależy od ich ilości. Porównanie wyników testów katalitycznych badanych preparatów Fe i Mn wskazało, że ich reaktywność zależy od użytej matrycy zeolitowej.

Spośród badanych preparatów żelazowych i manganowych, próbki Fe-FER oraz Mn-FER wykazywały wyższą aktywność katalityczną niż preparaty na osnowie *BEA. Badania in situ FTIR umożliwiły śledzenie przebiegu badanych reakcji utleniania na preparatach zawierających różne jony metali.

4. “Inteligentne” warstwy powierzchniowe ciecz-gaz wytworzone na bazie foto-aktywowanych surfaktantów oraz ich rola w stabilizowaniu interaktywnych pian

Projekt badawczy NAWA PPN/BIL/2018/1/00093 [2019-2021]
(koordynator projektu: dr Marcel Krzan)

W projekcie badamy nową klasę foto-aktywnych środków powierzchniowo czynnych, z których powstają dwuwymiarowe struktury na granicy faz ciecz / gaz, sprawiając, że poszczególne granice międzyfazowe, jak również cała makroskopowa piana reaguje na promieniowanie świetlne. Otwiera to nowe możliwości dla pian, takie jak zdolność samonaprawy lub możliwość dostosowania właściwości piany poprzez "włączanie" i "wyłączanie" wysokiej aktywności powierzchniowej foto-surfaktantów (bodziec świetlny jako przełącznik).

Wykorzystanie takich cząsteczek stwarza okazję do rekonstrukcji granic fazowych materii miękkiej w odpowiedzi na bodziec świetlny. Jest to możliwe, ponieważ wywołane światłem odwracalne zmiany (transformacja cis-trans) w cząsteczkach zaadsorbowanych na granicy faz powodują wytrącenie całego układu ze stanu równowagi. Natomiast powrót do stanu równowagi, wiąże się z nowymi właściwościami fizykochemicznymi, które są konsekwencją zmienionej struktury molekularnej pod wpływem napromieniowania światłem o określonej długości fali.

W czasie projektu przeprowadzono cykl badań właściwości powierzchniowych i pianotwórczych sulfonianu spiropyranu, zsyntezowanego w laboratorium naszego niemieckiego kooperanta (zadanie badawcze 1). W Munster/Niemcy analizowano aktywność i elastyczność powierzchniową metodą wiszącej kropli oraz prowadzono badania spektroskopowe za pomocą metody Sum Frequency Generation SFG (zadanie badawcze 2). W Krakowie wykonaliśmy komplementarne badania aktywności powierzchniowej tego związku rejestrując zmiany prędkości lokalnych wynoszonego pęcherzyka (zadanie badawcze 3). W obu grupach przeprowadzono równolegle badania zdolności pianotwórczej i stabilności pian wytworzonych na bazie badanych roztworów (zadanie badawcze 4). Badania przeprowadzano tzw. metodą membranową w kolumnie szklanej wyposażonej w spiek przepuszczalny dla gazu w podstawie kolumny.

W związku z tym, że badany związek wykazuje założone przez nas cechy "inteligentnego surfaktanta", w którym aktywność powierzchniowa zmienia się pod wpływem zmian pH i oświetlenia, wszystkie eksperymenty przeprowadzano w dwóch wybranych pH 2.7 i 5.3, dla każdego pH wykonując pomiary w ciemności i w warunkach silnego oświetlenia światłem niebieskim 440 nm. Uzyskane wyniki potwierdziły wpływ pH i oświetlenia na aktywność powierzchniową i zdolności pianotwórcze badanego.

Wyniki badań opublikowano w czasopiśmie ACS Langmuir oraz zaprezentowano na szeregu konferencji naukowych.

5. Zrozumienie molekularnych aspektów procesu nieprawidłowego fałdowania białek: badania *in situ* spektroskopowe i mikroskopowe

Projekt badawczy NAWA PPN/BIL/2018/1/00103 [2019-2021]
(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska, wykonawcy: mgr Paulina Komorek)

Zaadsorbowane filmy białkowe stanowią niezbędnych elementów budulcowych wielu urządzeń biotechnologicznych i biomedycznych. Potencjał na granicy faz może znacząco modulować zachowanie białek na powierzchniach, wpływając na ich strukturę i aktywność biologiczną. W badaniach lizozym został wykorzystany do zbadania wpływu przyłożonych potencjałów elektrycznych na adsorpcję i strukturę białka. Wartość pH i ładunek powierzchniowy określają ilość i strukturę drugorzędową zaadsorbowanego lizozymu na powierzchni Au. Pomiary *in-situ* z zastosowaniem spektroskopii absorpcyjnej z modulacją polaryzacji i odbiciem w podczerwieni wykazały, że stężenie zarówno zaadsorbowanych anionów, jak i lizozymu prowadziło do zmian konformacyjnych w warstwie białkowej, co zostało wykazane przez większą ilość zagregowanych β-arkuszów w warstwach wytworzonych przy dodatnim ładunku elektrody Au (Eads > Epzc). Zmiany struktury drugorzedowej obejmowały dwa równoległe procesy. Jedną z nich były zmiany w sieci hydratacji/wiązań wodorowych w helisach, prowadzące do zróżnicowanych struktur helikalnych: α-, 310- i/lub π-helisy. W drugim procesie β-zwoje, β-kartki i losowe zwoje wykazywały zdolność do tworzenia zagregowanych struktur typu β-kartek. Badania wyjaśniają zrozumienie zależnych od potencjału elektrycznego zmian zachodzących w procesie nieprawidłowego fałdowania białek.

6. Dynamiczne nanostruktury powierzchniowe na poruszających się granicach międzyfazowych ciecz/gaz i ciecz/ciecz

Projekt badawczy NAWA PPN/BEK/2020/1/00025 [2021-2022]
(kierownik projektu: dr hab. Jan Zawała, prof. IKiFP PAN)

Głównym celem projektu było wykorzystanie opracowanej na Wydziale Inżynierii Chemicznej Uniwersytetu Stanforda techniki kolorowej interferometrii (Dynamic Film Interferometry – DFI) do określenia wpływu dynamicznych struktur adsorpcyjnych tworzących się na unoszącym się pęcherzyku gazowym, na szybkość wyciekania filmu pianowego i jego stabilność (kinetykę koalescencji). Pomiar kinetyki wyciekania pojedynczego filmu pianowego polegał na video-obserwacji cienkiej warstwy cieczy, która tworzyła się pomiędzy utworzonym na kapilarze pęcherzykiem powierza, a powierzchnią roztworu. Zarejestrowane obrazy, na których obserwowano kolorowe prążki interferometryczne analizowano następnie w opracowanym oprogramowaniu, w celu obliczenia wartości grubości filmu (która oscyluje zwykle w przedziale od kilkudziesięciu mikronów do kilkunastu nanometrów). Niestety szybkość pęcherzyka przyczepionego do kapilary, wraz z którą porusza się on w roztworze przed utworzeniem ciekłego filmu, była zbyt mała, aby doszło do wyindukowania dynamicznych nanostruktur powierzchniowych, których wpływ na kinetykę wyciekania filmów chciałem zbadać. W tym celu zmodyfikowałem oryginalną koncepcję aparatury DFI, dostosowując ją do obserwacji filmów pianowych utworzonych przez pęcherzyki, które odrywają się w kontrolowany sposób od kapilary, poruszają się w roztworze pod wpływem siły wyporu i uderzały w powierzchnię roztworu. Wykorzystując opracowany układ eksperymentalny, wykonałem pomiary szybkości wyciekania filmów pianowych utworzonych przez pęcherzyki na różnych etapach tworzenia się dynamicznej warstwy adsorpcyjnej na ich powierzchni. Do badań, na tym etapie projektu, wybrałem dwa proste surfaktanty – kationowy bromek decylotrimetylo ammoniowy (C_{10}TAB) oraz niejonowy n-oktanol. Robocza hipoteza badawcza sformułowana została następująco: ze względu na odmienny stan warstwy adsorpcyjnej na powierzchni pęcherzyka, czas wyciekania filmu do krytycznej grubości pękania powinien być dłuższy, jeśli pęcherzyk przebędzie krótszą drogę w roztworze przed utworzeniem filmu pianowego. Aby zweryfikować hipotezę, zbadałem dwa skrajne przypadki, tj. kiedy odległość L pomiędzy kapilarą a powierzchnią roztworu, na której powstawał film, wynosiła 3 cm oraz 25 cm.

W przypadku roztworów C_{10}TAB zaobserwowano, że dla L = 3 cm występuje dodatnia korelacja pomiędzy stężeniem roztworów, a czasami życia pęcherzyków – im większe było stężenie surfaktantu, tym dłużej pęcherzyk przebywał na powierzchni roztworu przed pęknięciem. Dla L = 25 cm jednakże podobna korelacja istniała tylko dla stężeń < 1×10^{-3} mol/dm^3. Powyżej tego stężenia trend się odwracał. W przypadku n-oktanolu dodatnia korelacja występowała zarówno dla L = 3 cm jak i L = 25 cm. W roztworach obu surfaktantów jednakże, powyżej wartości granicznego stężenia, średnie czasy życia były dużo krótsze dla L = 25 cm, w porównaniu z L = 3 cm. Dla C_{10}TAB to graniczne stężenie wynosiło około 5×10^{-4} mol/dm^3, a dla n-oktanolu około 1×10^{-4} mol/dm^3. Taki wynik sugerował, że robocza hipoteza badawcza jest bardzo prawdopodobna. Na podstawie badań jakościowych nie można było jednak stwierdzić, czy o krótszym czasie życia filmu decyduje zwiększona szybkość jego wyciekania, czy też może pęka on przy wyższych grubościach. Aby zweryfikować, który mechanizm odpowiada za obserwowane zjawisko skrócenia czasów koalescencji dla L = 25 cm w porównaniu z L = 3 cm, wykorzystano technikę DFI do bezpośredniego pomiaru grubości filmu i jej ewolucji w czasie. W najniższych badanych stężeniach (5×10^{-5} oraz 1×10^{-4} mol/dm3) grubości pękania zmierzone dla L = 3 i 25 cm były praktycznie identyczne, natomiast dla wyższych stężeń zaobserwowano dużą różnicę w zależności od wartości L, która wynosiła średnio ok. 150 nm. Dla L = 25 cm filmy pękały na większych grubościach, w porównaniu z L = 3 cm. Ponadto, wartości krytycznych grubości pękania dla L = 25 cm oraz praktycznie wszystkich stężeń (oprócz 5×10^{-5} mol/dm^3) były do siebie zbliżone, co oznacza, że film nie tylko wyciekał podobnie, ale pękał na podobnych grubościach niezależnie, czy utworzony został w wysokim, czy niskim stężeniu surfaktantu.

Programy HORYZONT 2020

1. CollectionCare - Innowacyjne i ekonomiczne usługi monitorowania indywidualnych obiektów dziedzictwa kultury dla potrzeb prewencji konserwatorskiej w trakcie ekspozycji, przechowywania, manipulowania i transportu

Projekt badawczy nr 814624
(kierownik projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz, wykonawcy: dr Arkadiusz Janas, dr. Sergii Antropov, mgr. inż. Katarzyna Poznańska)

W ramach zadania badawczego kontynuowano rozpoczęte w latach poprzednich badania zmierzające do wyznaczenia właściwości mechanicznych płótna, płótna przeklejonego klejem zwierzęcym, płótna pokrytym warstwą zaprawy klejowej (gessa) w zależności od wilgotności względnej. Przeprowadzone pomiary wykonano za pomocą uniwersalnej maszyny wytrzymałościowej oraz z wykorzystaniem metod optycznych w komorach klimatycznych. Celem badań było rozszerzenie przeprowadzonych wcześniej badań na inne rodzaje płótna, uzyskanie lepszej statystyki pomiarowej i powtórzenie pomiarów budzących wątpliwości.

W przeprowadzonych badaniach wykorzystano płótno włoskiego producenta CTS o gęstym i rzadkim splocie. Przebadano także różne rodzaje kleju służącego do przeklejenia tj. kleju króliczego oraz krowiego kleju skórnego, oraz dwie metody nanoszenie kleju tzw. metodę na zimno, w której klej w postaci żelu nanoszony jest za pomocą noża oraz tzw. metodę na ciepło gdzie klej w formie ciekłej jest nanoszony za pomocą pędzla. Uzyskane wyniki pokazały, podobnie jak w przypadku pomiarów wcześniej wykonanych dla płótna producenta polskiego, że w badanych próbkach istnieje silna anizotropowość właściwości mechanicznych w zależności od kierunku płótna. Moduły sztywności dla kierunku odpowiadającego kierunkowi wątku są o rząd wielkości większe (~100 MPa) od kierunku odpowiadającego kierunkowi osnowy oraz kierunkowi diagonalnemu (~10 MPa). Pokrycie płótna warstwą kleju zwierzęcego znacznie zwiększa moduł sztywności (~400 MPa w kierunku wątku i ~100 MPa w kierunku osnowy), któremu towarzyszy jednak zachowanie anizotropowych właściwości mechanicznych. Obserwacji tej nie da się wyjaśnić zakładając laminarny układ kleju i płótna. Stąd płótno pokryte warstwą kleju zwierzęcego należy traktować jako materiał kompozytowy. Badania przeprowadzono w szerokim zakresie wilgotności względnej, od 30% do 90%. Wzrost wilgotności względnej powyżej wartości 75% powoduje spadek modłów sztywności przeklejonego płótna. Nie stwierdzono natomiast istotnego wpływu typu płótna, ilości kleju, typu kleju ani metody jego nanoszenia na własności mechaniczne przeklejonego płótna.

Ponadto wyznaczono współczynniki rozszerzalności wilgotnościowej badanych płócien. Współczynniki te zależą w pierwszej kolejności od kierunku płótna i są największe w kierunku osnowy. Współczynnik ten jest około dwukrotnie mniejszy w kierunku wątku. Nie stwierdzono istotnych zależności współczynnika od typu płótna, ilości kleju, typu kleju ani metody jego nanoszenia.

Dodatkowo, wyznaczono współczynnik skurczu schnięcia (ang. annealing shrinkage) przeklejonego płótna pod wpływem powtarzających się cykli zmian wilgotności względnej pomiędzy warunkami suchymi i wilgotnymi. Stwierdzono, że skurcz ten zachodzi głównie w kierunkach o mniejszej sztywności i może wynieść do 1%, podczas gdy w kierunku wzdłuż wątku wynosi on do 0,4%. Wartość skurczu schnięcia nie zależy od typu płótna, ilości kleju, typu kleju ani metody jego nanoszenia.

Przeprowadzone badania pozwoliły na uzyskanie podstawowych danych do rozwoju modelu komputerowego obrazu na płótnie oraz weryfikacji jego przewidywań.

2. IPERION-HS - Zintegrowane platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie

Projekt badawczy nr 871034
(kierownik projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz, wykonawcy: inż. Łukasz Berger, mgr inż. Magdalena Soboń, dr Marcin Strojecki, dr Marcin Bury)

Celem projektu IPERION HS jest stworzenie i eksploatacja rozproszonej ogólnoeuropejskiej infrastruktury badawczej, wzmacniającej kluczowe krajowe ośrodki badawcze o uznanej pozycji w dziedzinie nauk o dziedzictwie. Nauka o dziedzictwie to młoda i przebiegająca w poprzek tradycyjnych obszarów dziedzina naukowa, obejmująca szeroki zakres dyscyplin badawczych, umożliwiająca głębsze zrozumienie przeszłości i lepszą troskę o przyszłość dziedzictwa kulturowego. Od 2016 r. Nauki o dziedzictwie są włączane do Europejskiego Forum Strategii ds. Infrastruktury Badawczej jako jeden ze strategicznych obszarów w dziedzinie nauk społecznych i humanistycznych, gdzie reprezentowana jest przez europejską infrastrukturę badawczą w dziedzinie nauk o dziedzictwie. IPERION HS zapewni zaawansowanej społeczności nauki o dziedzictwie kolejny poziom integracji ogólnoeuropejskiej w oparciu o Europejską Infrastrukturą Badawczą dla Nauki o Dziedzictwie. Projekt jest kolejnym krokiem w kierunku ujednoliconego naukowego podejścia do najbardziej zaawansowanych analizy instrumentalnych, interpretacji, ochrony, dokumentacji i zarządzania obiektami dziedzictwa w dziedzinie historii sztuki, konserwacji, archeologii i paleontologii. Projekt IPERION HS oferuje nie tylko ponadnarodowy dostęp do szerokiej gamy instrumentów naukowych i zaawansowanych metodologii badawczych, ale po raz pierwszy skoncentruje się na potrzebach konserwacji prewencyjnej w muzeach i innych instytucjach pamięci. Jednym z kluczowych działań będzie opracowanie cyfrowej platformy prewencji konserwatorskiej (PCDP), umożliwiającej użytkownikom modelowanie i planowanie przyszłych scenariuszy ryzyka oraz odpowiednie dostosowywanie działań przeciwdziałających zagrożeniom. PCDP będzie pierwszym krokiem społeczności naukowej zajmującej się dziedzictwem do aktywnego wspierania europejskiej chmury dla otwartej nauki w celu zbudowania konkurencyjnej gospodarki opartej na danych i wiedzy w Europie.

W drugim roku realizacji projektu stworzono i zaimplementowano narzędzia wspomagające podejmowanie decyzji dla praktyków, muzealników i właścicieli obiektów. Objęły one w pierwszej kolejności narzędzie HERIe pozwalające szacować ryzyko uszkodzeń mechanicznych w wyniku zmian środowiskowych. Opracowano moduł degradacji chemicznej pozwalający na obliczanie względnego czasu życia obiektów podatnych na proces degradacji, takich jak papier, drewno, tkaniny i tworzywa sztuczne, który obliczany jest w stosunku do warunków referencyjnych – 20°C i 50% wilgotności względnej. Moduł oparty jest o trzy funkcje degradacji opracowane dla kwaśnego papieru, octanu celulozy oraz ogólnej grupy materiałów. Ponadto, moduł pozwala obliczać czas życia materiałów wrażliwych wyrażany w latach dla octanu celulozy i kwaśnego papieru. Następnym zaimplementowanym modułem jest moduł „pożarowy" pozwalający obliczać przewidywaną utratę wartości zbioru na skutek pożaru w zależności od typu i konstrukcji budynku, w którym jest on przechowywany, wrażliwości materiału na działanie wody i ognia oraz ilości obiektów znajdujących się w gablotach. Zaimplementowano także moduł do obliczeń stężenia zanieczyszczeń gazowych w pomieszczeniach w oparciu o stężenia tych zanieczyszczeń na zewnątrz w zależności o typu materiału, z którego wykonane jest pomieszczenie oraz krotności wymiany powietrza wewnętrznego z powietrzem zewnętrznym. Wszystkie moduły zostały przetestowane, dogłębnie sprawdzone a ich działanie zoptymalizowane.

3. NanoPaInt - Dynamika gęstych nanosuspensji: droga do nowych funkcjonalnych materiałów

Projekt badawczy H2020-MSCA-ITN-2020 nr 955612
(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)

Jednym z zastosowań nanocząstek jest kontrola właściwości objętościowych i powierzchniowych cieczy. Są szeroko stosowane w przemyśle spożywczym i produktach chemii gospodarczej, stanowią zasadniczy składnik formulacji tuszów, farb oraz powłok, są wykorzystywane do produkcji materiałów funkcjonalnych i są bardzo obiecującymi nośnikami leków. Obecność nanocząsteczek w powietrzu lub wodzie może wpływać na ekologię Ziemi i zdrowie ludzi. Chociaż rozcieńczone zawiesiny nanocząstek, które są bliskie równowagi zostały szeroko zbadane, w wielu ważnych zastosowaniach, takich jak przemysł spożywczy i elektroniczny, zawiesiny te są gęste lub silnie oddziałują ze sobą, podlegają znacznym naprężeniom zewnętrznym i znajdują się daleko od stanu równowagi. Podstawowe znaczenie ma identyfikacja oddziaływań między nanocząstkami w cieczy i na powierzchniach międzyfazowych, pozwalające na efektywne wykorzystanie w zastosowaniach praktycznych. Celem ogólnym sieci nanoPaInt jest określenie właściwości, modelowanie i zastosowanie silnie oddziałujących układów nanocząstek poza stanem równowagi. Cele szczegółowe to: zrozumienie silnych oddziaływań między nanocząstkami i ich wpływu na właściwości reologiczne zawiesin; zrozumienie zachowania nanocząstek w złożonych przepływach międzyfazowych pod wpływem sił zewnętrznych oraz zwilżania i odwadniania; projektowanie i zastosowania inteligentnych nanozawiesin kapilarnych; ich suszenie do wytwarzania funkcjonalnych układów supercząstkowych. Celem szkoleniowym sieci nanoPaInt jest wspieranie rozwoju kariery młodych naukowców zarówno w sektorach akademickim, jak i pozaakademickim oraz szkolenie nowej generacji kreatywnych, mobilnych, przedsiębiorczych i innowacyjnych początkujących badaczy (ESR) poprzez prowadzenie interdyscyplinarnych badań, udział w lokalnych i ogólnosieciowych działaniach szkoleniowych oraz międzysektorowe i międzynarodowe staże. W sieci bierze udział 14 uczestników reprezentujących europejskie instytucje badawcze i laboratoria przemysłowe.

Celem projektu badawczego ESR prowadzonego w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN jest otrzymanie bimetalicznych nieutlenialnych nanocząstek typu rdzeń/powłoka, o wysokiej stabilności w procesie agregacji, do formulacji tuszów i past przewodzących. Zsyntetyzowane preparaty zostaną wykorzystane w opracowanym procesie wytwarzania obwodów drukowanych o wysokiej przewodności elektrycznej. W pierwszym roku realizacji projektu przeprowadzono rekrutację ESR, dokonano przeglądu literaturowego i wykonano wstępne prace laboratoryjne syntezy nanocząstek rdzeń/powłoka (Ni/Au, Sn/Ag, Sn/Au) i nanodrutów Cu/Ag.

Projekty akcji EU COST

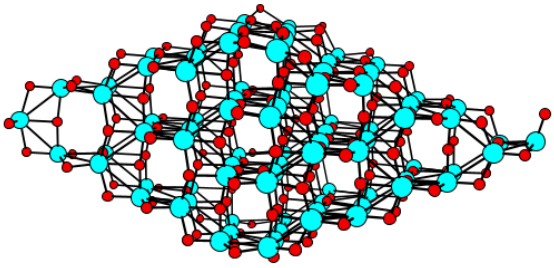
1. Obliczeniowa chemia materiałowa dla wydajnego procesu rozkładu wody na nanokryształach zbudowanych z pierwiastków nieszlachetnych

EU COST Action nr 18234 „Computational materials sciences for efficient water splitting with nanocrystals from abundant elements”
(koordynator krajowy: prof. dr hab. Małgorzata Witko)

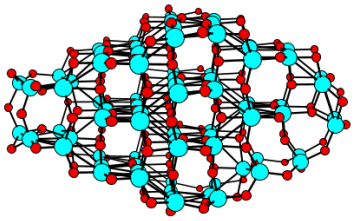
Celem niniejszej akcji COST jest łączenie wiedzy dostarczanej dzięki stosowaniu różnych metod modelowania molekularnego (DFT, mechaniki i dynamiki molekularnej, dynamiki Monte-Carlo, modelowania mikrokinetycznego) i różnych pakietów obliczeniowych, ułatwiające modelowanie procesów towarzyszących rozkładzie wody i prowadzące w konsekwencji do opracowania nowych materiałów elektrokatalitycznych.

Grupa z IKiFP PAN zaangażowana była w realizację zadania badawczego pt. „Nanokryształy o bardzo małych rozmiarach”. Stosując metodę DFT (Teoria Funkcjonałów Gęstości), przy użyciu funkcjonału PBE i bazy funkcyjnej def2-TZVP wyznaczono optymalne geometrie trzech nanokryształów TiO_2 i zbadano ich strukturę elektronową. Dwa z nich reprezentują krystaliczną formę dwutlenku tytanu, jeden o geometrii bipiramidy tetragonalnej (Rysunek a), drugi o geometrii ściętej bipiramidy tetragonalnej (Rysunek b). Trzeci nanokryształ reprezentuje amorficzny TiO_2 (Rysunek c). Określono wielkość przerwy wzbronionej dla poszczególnych układów, która wynosi odpowiednio 2.41 eV, 2.40 eV i 2.21 eV.

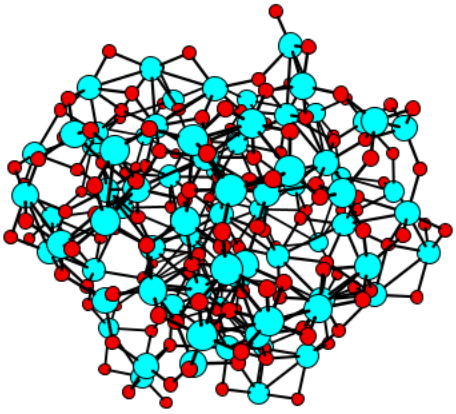
a)



b)



c)



Rysunek. Struktury nanokryształów TiO_2: a) o pokroju bipiramidy tetragonalnej, $(TiO_2)_{84}$, b) o pokroju ściętej bipiramidy tetragonalnej, $(TiO_2)_{78}$, c) o pokroju sfery, $(TiO_2)_{78}$.

Projekty NORWEGIAN RESEARCH COUNCIL

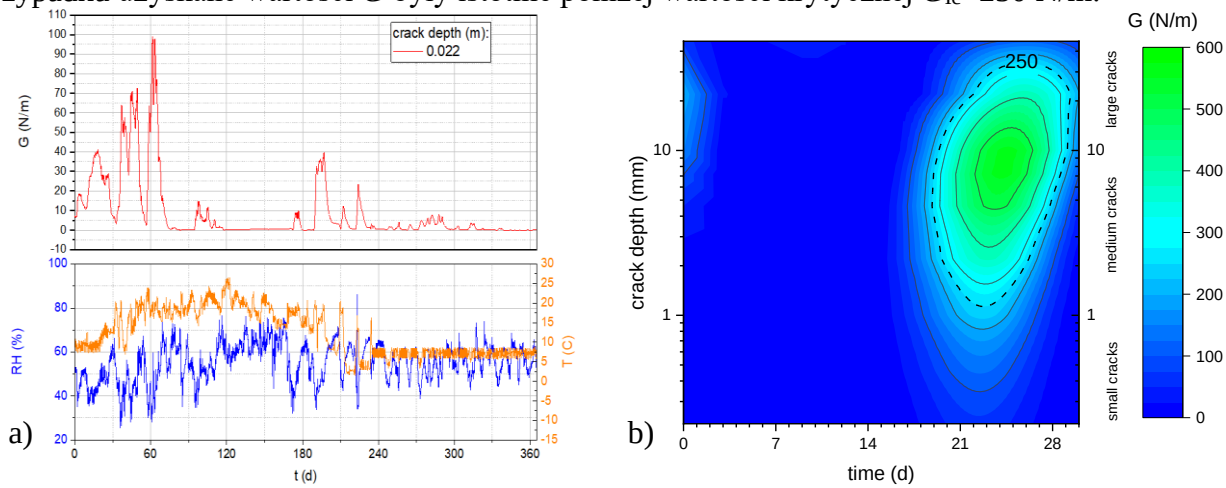
1. Zrównoważone zarządzanie budynkami zabytkowymi w perspektywie długookresowej

Projekt SyMBoL Norweskiej Rady Badań Naukowych nr 274749 [2018-2021]
(*kierownik projektu: dr Marcin Strojecki*)

Działalność badawcza realizowana w ramach projektu była ukierunkowana zarówno na prace eksperymentalne jak i teoretyczne modelowanie komputerowe. Prace eksperymentalne obejmowały kontrolowane testy w laboratorium oraz długookresowe monitorowanie wpływu warunków mikroklimatycznych na ryzyko fizycznego uszkodzenia drewnianych elementów wrażliwych na wilgoć w dwóch wybranych kościołach słupowych (Heddal i Ringebu). Zarówno wyniki eksperymentalne uzyskane w laboratorium, jak i wyniki zebrane podczas monitoringu terenowego dostarczyły z jednej strony wiarygodnej informacji o bezpiecznych zakresach wahań parametrów środowiskowych (temperatury - T i wilgotności względnej powietrza - RH). Z drugiej strony wyniki zapewniły eksperymentalną weryfikację koncepcji dowiedzionych fluktuacji.

W ramach teoretycznego zadania badawczego opracowano model masywnego elementu drewnianego - rzeźby lub elementu konstrukcyjnego np. kolumny. Jednak stworzenie oprogramowania jako dodatkowego modułu do narzędzia HERIe opracowanego przez partnera konsorcjum okazało się niewykonalne. Jest to spowodowane nieliniową zależnością najważniejszego parametru symulacyjnego G (szybkości uwalniania energii w obiekcie drewnianym w wyniku fluktuacji RH) od amplitudy zmiany RH, co sprawia, że transformata Fouriera nie ma zastosowania do badanego problemu. Wykazano, że pełna symulacja numeryczna dla każdej kombinacji średnicy obiektu, głębokości pęknięć i parametrów środowiskowych jest niepraktyczna ze względu na bardzo czasochłonne obliczenia. W związku z tym zaproponowano mapy ryzyka (Rys. 1b) pozwalające na arbitralny dobór głębokości i czasu zmiany RH oraz oszacowanie wielkości rozszerzenia pęknięcia, z naciskiem na zmiany RH charakterystyczne dla wnętrz kościołów słupowych.

Jako przykład przeprowadzono pełną symulację w oprogramowaniu COMSOL dla pęknięcia o głębokości 22 mm i rocznych danych klimatycznych zarejestrowanych w kościele w Heddal. Dane obejmowały odczyty T i RH rejestrowane przez czujnik co 5 minut, ale próbkowanie ograniczono do jednego odczytu na godzinę. Do symulacji została wybrana taka głębokość pęknięcia dla której wartość G w symulacji skokowej zmiany RH była największa i jednocześnie była jedną z krytycznych głębokości przy sinusoidalnych zmianach RH przy uwzględnieniu T_{sin} dłuższego niż 30 dni. Wyniki symulacji wraz z parametrami T i RH przedstawiono na Rys. 1a). Można zauważyć, że w tym przypadku uzyskane wartości G były istotnie poniżej wartości krytycznej G_{Ic}=250 N/m.



Rys. 1 a) Pełna symulacja dla głębokości pęknięcia 22 mm i rocznych danych klimatycznych zarejestrowanych w kościele w Heddal. b) Dwuparametryczna mapa zagrożeń dla sinusoidalnej zmiany RH ze stałą A_{sin}=30% i okresem T_{sin}=30 dni. Głębokość pęknięć jest wykreślana na osi y, czas suszenia na osi x, a odpowiednia szybkość uwalniania energii jest wykreślana w postaci izolinii. G_{Ic} jest reprezentowany przez linię przerywaną.

Projekty strukturalne funduszy Unii Europejskiej

1. Środowiskowe Studia Doktoranckie „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej" (InterDokMed)

Projekt NCBR POWR.03.02.00-00.I013/16 [2017-2022]
(kierownik projektu: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, prof. IKiFP)

Projekt realizowany w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój 2014-2020, działanie 3.2 Studia doktoranckie, Oś III Szkolnictwo wyższe dla gospodarki i rozwoju. Celem projektu jest zwiększenie jakości i efektywności kształcenia na studiach doktoranckich, poprzez opracowanie rozszerzonego programu, jego wdrożenie i realizację, w ramach Środowiskowych Studiów Doktoranckich (ŚSD) „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej" InterDokMed.

Projekt realizowany jest przez konsorcjum złożone z pięciu jednostek naukowych, posiadających kategorię co najmniej A i status KNOW. Koordynatorem projektu jest Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, partnerami zaś: Instytut Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN, Wydział Chemii UJ i Wydział Lekarski UJ CM. Dobór jednostek realizujących daje gwarancję realizacji interdyscyplinarności poprzez realizację badań naukowych obejmujących więcej niż jeden obszar wiedzy (nauki ścisłe/nauki medyczne), więcej niż jedną dziedzinę (nauki chemiczne/fizyczne/medyczne) i kilka dyscyplin naukowych (fizyka, chemia, farmakologia, medycyna).

W 2021 r. kształcenie kontynuowało 45 doktorantów (z 50 przyjętych w dwóch rekrutacjach). Program kształcenia w roku akademickim 2020/2021 r. obejmował wyłącznie „Seminarium doktoranckie", na którym doktoranci przedstawiali zrealizowane w ramach pracy badawczej wyniki. W związku sytuacją epidemiczną zajęcia zrealizowano w trybie on-linie. Pozostałe elementy programu ramowego i zajęcia dodatkowe wynikające z realizacji projektu, zostały zrealizowane, zgodnie z planem, w poprzednich latach. Wszyscy doktoranci uzyskali zaliczenie IV roku. Obok kształcenia programowego, doktoranci Środowiskowych Studiów Doktoranckich InterDokMed realizowali na bieżąco swoje badania naukowe, pod opieką dwóch opiekunów, z dwóch różnych jednostek partnerskich, reprezentujących różne dyscypliny naukowe.

W roku akademickim 2020/2021 r. doktoranci InterDokMed odbyli 10 staży zagranicznych, uczestniczyli w 14 kursach/warsztatach, tematycznie związanych z realizowaną pracą. Byli współautorami 72 publikacji z listy JCR, 2 rozdziałów w książkach, 2 artykułów popularnonaukowych. Byli współautorami 61 prezentacji ustnych i 53 plakatów zaprezentowanych na konferencjach krajowych i zagranicznych. Doktoranci InterDokMed byli laureatami pięciu nagród m.in. za najlepsze wystąpienie, artykuł popularnonaukowy, uzyskali stypendia konferencyjne czy wreszcie stypendia dla najlepszych doktorantów, w jednostkach macierzystych i stypendia Prezesa PAN.

2 osoby zakończyły studia po IV roku, 43 doktorantów zwróciło się z prośbą o przedłużenie studiów doktoranckich na V rok i takie zgody otrzymali. Do końca 2021 r. 6 osób obroniło swoją rozprawę doktorską, 5 spośród nich otrzymało wyróżnienie.

Fundusze Europejskie
Wiedza Edukacja Rozwój
Unia Europejska
Europejski Fundusz Społeczny

2. Interdyscyplinarne Środowiskowe Studia Doktoranckie „Fizyczne, Chemiczne i Biofizyczne Podstawy Nowoczesnych Technologii i Inżynierii Materiałowej" (FCB)

Projekt NCBiR POWR.03.02.00-00-I004/16 [2017-2022]
(z-ca kierownika projektu: dr hab. inż. A. Micek-Ilnicka)

Projekt FCB realizowany jest ze środków Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój (POWER) przyznanych w wyniku konkursu ogłoszonego przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju (NCBiR) w 2017 r. na interdyscyplinarne programy studiów doktoranckich. Decyzją NCBiR projekt FCB został przedłużony do 31 października 2023. Projekt koordynowany jest przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej (WFiIS) Akademii Górniczo-Hutniczej (AGH) z udziałem partnerskim 4 instytucji: Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki (WIMiC) AGH, Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (WCh UJ), Instytutu Fizyki Jądrowej (IFJ) im. Henryka Niewodniczańskiego PAN oraz Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni (IKiFP) im. Jerzego Habera PAN w Krakowie.

Studia doktoranckie FCB posiadają charakter interdyscyplinarny. Doktoranci reprezentują jednostki badawcze reprezentujące dziedzinę nauk ścisłych i przyrodniczych, w tym dyscypliny takie jak nauki chemiczne, fizyczne oraz dziedzinę nauk inżynieryjno-technicznych z dyscypliną inżynieria materiałowa oraz inżynieria chemiczna. Założenia projektu przewidywały kształcenie 75 doktorantów, aktualnie w ramach projektu kształci się 72 doktorantów, w tym w IKiFP PAN studiują 3 osoby. Do września 2021 odbyły się 4 obrony doktorantów FCB (z IFJ AGH i z WIMiC AGH), w tym 2 obrony zostały wyróżnione. W 2021 roku 3 doktorantki FCB z IKiFP PAN rozpoczęły postępowania awansowe o nadanie stopnia doktora.

Harmonogram studiów FCB, zrealizowany w roku akademickim 2019/2020 obejmował 15 godzin seminarium doktoranckiego, prowadzonego w semestrze letnim. Seminarium doktoranckie odbywało się *on-line* poprzez aplikację *Skype*. Doktoranci FCB odbywali zajęcia w 4 grupach, w tym jedna, 24-osobowa grupa była prowadzona przez pracownika IKiFP PAN. W ramach programu studiów FCB, obejmującego prowadzenie zajęć dydaktycznych, w wymiarze 30 godzin|) doktoranci FCB wykonali kolejne filmy instruktażowe do zajęć laboratoryjnych dla studentów WIMiC AGH z zakresu pracowni z analizy jakościowej i ilościowej

Dorobek naukowy doktorantów FCB z IKiFP PAN (3 osób) od początku trwania projektu FCB obejmuje:7 publikacji, 2 zgłoszenia patentowe, 5 wystąpień ustnych. Doktoranci uczestniczyli w realizacji 5 grantów w tym 2 grantów Opus jako wykonawcy, 1 grantu Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris, 1 grantu European Union Soft Matter Infrastructure i 1 grantu Preludium. (2018-2021), kierowanego przez doktorantkę FCB.

Fundusze Europejskie
Wiedza Edukacja Rozwój
Unia Europejska
Europejski Fundusz Społeczny

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. Biokompatybilne piany i emulsje stabilizowane naturalnymi surfaktantami i cząsteczkami do zastosowań biomedycznych

Polsko-włoski wspólny projekt badawczy na lata 2020-2022 – wg porozumienia o współpracy naukowej między PAN i włoskim National Research Council CNR
(kierownictwo projektu – dr Marcel Krzan)

Celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania i nanoszenia stabilnych pian ciekłych oraz emulsji wytwarzanych na bazie mieszanin hypoalergicznych, nietoksycznych biologicznych polimerów oraz tzw. biosurfaktantów. Podobne układy mogą w niedalekiej przyszłości stać się podstawą kompozycji substancji dermatologicznych wielorakiego zastosowania. Filmy powierzchniowe tworzone na bazie takich kompozycji o naturalnej aktywności biologicznej byłyby pierwszą linią obrony przed różnymi patogenami. Będą to substancje jednocześnie nawilżające oraz regenerujące skórę. Opracowane układy poza przemysłem kosmetycznym i farmaceutycznym znajdą zastosowanie jako środki do konserwacji żywności oraz biologiczne odpowiedniki pestycydów. Wprowadzenie ich do produkcji i ogólnego zastosowania pozwoli również na znaczną redukcję zanieczyszczenia środowiska przez stosowane obecnie syntetyczne surfaktanty.

W trakcie drugiego roku projektu pracowano równolegle nad układami pianowymi i emulsyjnymi zawierającymi saponinę i chitosan, przy czym emulsje oparte były o olej trój glicerydowy MCT Migoil. Badania prowadzono symultanicznie wykorzystując zaplecze aparaturowe obu instytutów w Polsce i Włoszech.

Udowodniono, przy wykorzystaniu technik eksperymentalnych, tj. nieliniową spektroskopię w podczerwieni, zwana Sum-Frequency Generation oraz pomiary aktywności i elastyczności powierzchniowej, że w saponina i chitosan ulegają wzajemnym interakcją w roztworze, tworząc układy skompleksowane, dzięki czemu nieaktywny powierzchniowo chitosan w znacznym nadmiarze adsorbuje w warstwie powierzchniowej, w dramatyczny sposób zmieniając jej elastyczność i stabilność powierzchniową

Środki projektu pozwoliły również na odbycie dwóch tygodniowych staży badawczych w Genui dla dr Marcela Krzana oraz dr Eweliny Jarek. Uzyskane wyniki dotyczące układów emulsyjnych zostały zaprezentowane w referacie ustnym na międzynarodowej konferencji naukowej ECIS 2021 European Colloid and Interface Society w Atenach we wrześniu 2021r. W przygotowaniu są dwie kolejne publikacje zawierające dane projektowe, które ukażą się w pierwszej połowie 2022 roku w czasopismach ISI/JCR (pierwsza publikacja projektowa ukazała się w końcu 2020 roku).

2. Biokompatybilne emulsje i piany stabilizowane cząstkami stałymi do zastosowań biomedycznych

Polsko-Bułgarski wspólny projekt badawczy na lata 2018-2021 – wg porozumienia o współpracy naukowej między PAN i Bułgarską Akademia Nauk BAS
(kierownictwo projektu – dr Marcel Krzan)

Celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania i nanoszenia stabilnych pian ciekłych oraz emulsji wytwarzanych na bazie mieszanin hypoalergicznych, nietoksycznych biologicznych polimerów, głównie tzw. biosurfaktantów. Opracowane formulacje chcemy wzbogacić dodatkowo o nanocząstki m.in. srebra metalicznego lub inne nanocząstki pochodzenia naturalnego o (np. chitozanu, fibroiny jedwabiu lub lipozomów). Filmy powierzchniowe tworzone na bazie takich kompozycji o naturalnej aktywności biologicznej byłyby pierwszą linią obrony przed różnymi patogenami.

W trakcie projektu wykonano pomiary dynamicznej i równowagowej aktywności powierzchniowej i elastyczności powierzchniowej w roztworach jednego z tzw. „zielonych surfaktantów" t.j. n-dodecylo-etylo-arginianu wzbogaconych obecnością nanocząstek koloidalnej krzemionki (o różnych wielkościach cząstek – 6, 9 i 30nm). Na podstawie uzyskanych wyników określono przedziały stężeń badanych substancji i mieszanin niezbędne do wykształcenia stabilnego filmu pianowego, co zostało zweryfikowane we testach w aparacie do pomiarów stabilności pian.

Stwierdzono, że obecność cząstek wpływa na stabilność warstw powierzchniowych wytworzonych na bazie n-dodecylo-etylo-arginianu znacznie więcej niż na filmy generowane z BSA lub metylocelulozy. Cząstki o średnicy poniżej 10 nm, zwiększały znacznie trwałość i wysokość piany z LAE. Ponadto, otrzymane wyniki opisujące początkowe wysokości pian były w dobrej zgodności z danymi uzyskanymi na podstawie pomiarów zmian dynamicznego napięcia powierzchniowego.

Wykonane testy pianotwórcze i stabilności pianowej wykazały, że pianotwórczość jest ściśle skorelowana z procesami adsorpcji powierzchniowej badanych bio-surkatktantów oraz układów mieszanych zawierających biosurfaktanty i cząstki stałe.

Uzyskane w projekcie wyniki zostały zaprezentowane w trakcie konferencji naukowych oraz będą zgłoszone we wspólnej publikacji w czasopiśmie ISI/JCR w 2022 roku. Wykorzystano jej również częściowo do przygotowania jednego rozdziału przeglądowego w książce naukowej.

Projekty programu Erasmus+

1. Projekt "Mobilność edukacyjna między krajami programu Erasmus+" dla studentów i pracowników

Program EU Erasmus+ [2014-2021]
(koordynator programu: dr hab. inż. Aleksandra Pacuła)

W 2021 roku zrealizowano następujące wyjazdy pracowników na szkolenia:

- Marcel Krzan – National Research Council, Institute of Condensed Matter Chemistry of Technologies for Energy, Genewa (Włochy)
- Marcel Krzan – Institute of Chemical Process Fundamentals of the CAS, Praga (Czechy)
- Piotr Batys – Aalto University, Aalto (Finlandia)
- Maria Morga – Aalto University, Aalto (Finlandia)
- Maciej Guzik – University College Dublin, Dublin (Irlandia)
- Maciej Guzik – University of Belgrade, Belgrad (Serbia)
- Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk – Foundation for Research and Technology – Hellas, Institute of Chemical Engineering Sciences, Patras (Grecja)
- Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk – Reykjavik University, Reykjavik (Islandia)
- Monika Wasilewska – Institute of Technical Physics and Materials Science Centre for Energy Research, Budapeszt (Węgry)
- Magdalena Oćwieja – University of Malaga, Malaga (Hiszpania)
- Paweł Wolski – University of Edinburgh, Edynburg (Wielka Brytania)
- Magdalena Procner – Philipps-University Marburg, Marburg (Niemcy)
- Maciej Szaleniec – Philipps-University Marburg, Marburg (Niemcy)

Efektem mobilności było m.in. zebranie materiału badawczego do artykułów w czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu i prezentacji konferencyjnych.

Projekt będzie kontynuowany w 2022 r., a na rok akademicki 2022/2023 zostanie złożony kolejny wniosek o finansowanie.

Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN

Polski Klub Katalizy

Komitet Chemii PAN

European Research Institute of Catalysis

LIII OGÓLNOPOLSKIE KOLOKWIUM KATALITYCZNE

LIII POLISH ANNUAL CONFERENCE ON CATALYSIS

22-24.09.2021 Kraków

Kościół i Klasztor Sióstr Norbertanek na Salwatorze

6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface

JUNE 6th – 9th, 2021, Kraków, Poland

BOOK of ABSTRACTS

34th M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics

Monday 27 September 2021 - Wednesday 29 September 2021

Online

Book of Abstracts

Dorobek publikacyjny instytutu za rok 2021

PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM

MONOGRAFIA

1. R. Tadeusiewicz, M. Szaleniec "Lexicon of neural networks" Moskwa, 2021, [ISBN 978-5-9912-0833-8]

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY JOURNAL CITATION REPORTS

1 M.Y. Abdollahzadeh Jamalabadi, N. Zabari, Ł. Bratasz "Three-dimensional numerical and experimental study of fracture saturation in panel paintings", Wood Science and Technology, 55(6) (2021) 1555-1576, DOI: 10.1007/s00226-021-01328-z

2 Z. Adamczyk, P. Batys, J. Barbasz "SARS-CoV-2 virion physicochemical characteristics pertinent to abiotic substrate attachment", Current Opinion in Colloid and Interface Science, 55 (2021) 101466, DOI: 10.1016/j.cocis.2021.101466

3 Z. Adamczyk, P. Batys, W. Płaziński, M. Morga, D. Lupa, A. Michna "Macroion molecule properties from slender body hydrodynamics", Polymers for Advanced Technologies, 32(10) (2021) 3900-3908, DOI: 10.1002/pat.5319

4 Z. Adamczyk, M. Nattich-Rak "Formation of myoglobin corona at polymer microparticles", Colloids and Interfaces, 5(2) (2021) 27, DOI: 10.3390/colloids5020027

5 K.K Adepu, S. Kachhap, A. Anishkin, S.V. Chintapalli “Structural and Energetic Insights Into the Interaction of Niacin With the GPR109A Receptor”, Bioinformatics and Biology Insights, 15 (2021), DOI: 10.1177/11779322211056122

6 J. Andrys, J. Heider, T. Borowski "Comparison of different approaches to derive classical bonded force-field parameters for a transition metal cofactor: a case study for non-heme iron site of ectoine synthase", Theoretical Chemistry Accounts, 140(8) (2021) 115, DOI: 10.1007/s00214-021-02796-z

7 K. Bahranowski, A. Klimek, A. Gaweł, E.M. Serwicka "Rehydration Driven Na-Activation of Bentonite—Evolution of the Clay Structure and Composition", Materials, 14(24) (2021) 7622, DOI: 10.3390/ma14247622

8 E. R. Bandala, R. Sadek, J. Gurgul, K. Łątka, M. Zimowska, L. Valentin, O.M. Rodriguez-Narvaez, S. Dzwigaj "Assessment of the capability of Fe and Al modified BEA zeolites to promote advanced oxidation processes in aqueous phase", Chemical Engineering Journal, 409 (2021) 127379, DOI: 10.1016/j.cej.2020.127379

9 A. Barbasz, M. Oćwieja, N. Piergies, D. Duraczyńska, A. Nowak "Antioxidant-modulated cytotoxicity of silver nanoparticles", Journal of Applied Toxicology, 41 (2021) 1863-1878, DOI: 10.1002/jat.4173

10 P. Batys, D. Fedorov, P. Mohammadi, L. Lemetti, M.B. Linder, M. Sammalkorpi "Self-Assembly of Silk-like Protein into Nanoscale Bicontinuous Networks under Phase-Separation Conditions", Biomacromolecules, 22 (2) (2021) 690-700, DOI: 10.1021/acs.biomac.0c01506

11 C. Bertolin, L. de Ferri, M. Strojecki "Application of the Guggenheim, Anderson, de Boer equation to study the impact of sealing treatments on pine wood sorption characteristics", Material Design and Processing Communications, 3(5) (2021) e189, DOI: 10.1002/mdp2.189

12 A. Biessikirski, K. Barański, M. Pytlik, Ł. Kuterasiński, J. Biegańska, K. Słowiński "Application of silicon dioxide as the inert component or oxide component enhancer in ANFO ", Energies, 14(8) (2021) 2152, DOI: 10.3390/en14082152

13 A. Biessikirski, D. Czerwonka, J. Biegańska, Ł. Kuterasiński, M. Ziąbka, M. Dworzak, M. Twardosz "Research on the possible application of polyolefin waste-derived pyrolysis oils for ANFO manufacturing", Energies, 14(1) (2021) 172, DOI: 10.3390/en14010172

14 A. Biessikirski, S. Gotovac Atlagić, M. Pytlik , Ł. Kuterasiński, M. Dworzak, M. Twardosz , D. Nowak-Senderowska, D.B. Napruszewska "The influence of microstructured charcoal additive on ANFO's properties", Energies, 14(14) (2021) 4354, DOI: 10.3390/en14144354

15 M. Bonarowska, Z. Kaszkur, K. Matus, A. Drelinkiewicz, T. Szumełda, A. Kubas "Towards High Efficacy of Pd-Au/C Catalyst for Tetrachloromethane Hydrodechlorination", Chemistry 3(1) (2021) 338-359, DOI: 10.3390/chemistry3010025

16 R. Bonetta, G.J. Hunter, C.H. Trinh, T. Borowski, A.G. Fenech, M. Kulp, L.C. Tabares, S. Un, T. Hunter "Substitution of histidine 30 by asparagine in manganese superoxide dismutase alters biophysical properties and supports proliferation in a K562 leukemia cell line", European Biophysics Journal, 50 (2021) 571-585, DOI: 10.1007/s00249-021-01544-2

17 M. Borkowski, J. Zawala "Influence of temperature on rising bubble dynamics in water and n-pentanol solutions", Minerals, 11(10) (2021) 1067, DOI: 10.3390/min11101067

18 A. Bratek-Skicki, M. Sadowska, J. Maciejewska-Prończuk, Z. Adamczyk "Nanoparticle and bioparticle deposition kinetics: Quartz microbalance measurements", Nanomaterials, 11 (1) (2021) 145(1-42), DOI: 10.3390/nano11010145

19 E. Broclawik, P. Kozyra, M. Mitoraj, M. Radoń, P. Rejmak "Zeolites at the Molecular Level: What Can Be Learned from Molecular Modeling", Molecules, 26 (1) (2021) 1511, DOI: 10.3390/molecules26061511

20 K.A. Chalupka, R. Sadek, L. Szkudlarek, P. Mierczynski, W. Maniukiewicz, J. Rynkowski, J. Gurgul, S. Casale, D. Brouri, S. Dzwigaj "The catalytic activity of microporous and mesoporous NiCoBeta zeolite catalysts in Fischer–Tropsch synthesis", Research on Chemical Intermediates, 47(1) (2021) 397-418, DOI: 10.1007/s11164-020-04343-0

21 A. Czakaj, E. Jarek, M. Krzan, P. Warszyński "Ethyl lauroyl arginate, an inherently multicomponent surfactant system", Molecules, 26(19) (2021) 5894, DOI: 10.3390/molecules26195894

22 J. Czechowska, S. Skibiński, M. Guzik, A. Zima "Silver decorated βTCP-poly(3hydroxybutyrate) scaffolds for bone tissue engineering", Materials, 14(15) (2021) 4227, DOI: 10.3390/ma14154227

23 A. Czyżowska, A. Barbasz, L. Szyk-Warszyńska, M. Oćwieja, E. Csapó, D. Ungor "The surface-dependent biological effect of protein-gold nanoclusters on human immune system mimetic cells", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 620 (2021) 126569, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2021.126569

24 M. Dąbkowska, Z. Ulańczyk, K. Łuczkowska, D. Rogińska, A. Sobuś, M. Wasilewska, M. Olszewska, K. Jakubowska, B. Machaliński "The role of the electrokinetic charge of neurotrophis-based nanocarriers: protein distribution, toxicity, and oxidative stress in in vitro setting", Journal of Nanobiotechnology, 19 (2021) 258, DOI: 10.1186/s12951-021-00984-4

25 N. Diban, A. Pacuła, I. Kumakiri, C. Barquín, M.J. Rivero, A. Urtiaga, I. Ortiz "TiO_2–Zeolite Metal Composites for Photocatalytic Degradation of Organic Pollutants in Water", Catalysts, 11(11) (2021) 1367, DOI: 10.3390/catal11111367

26 B. Donarska, M. Świtalska, W. Płaziński, J. Wietrzyk, K.Z. Łączkowski "Effect of the dichloro-substitution on antiproliferative activity of phthalimide-thiazole derivatives. Rational design, synthesis, elastase, caspase 3/7, and EGFR tyrosine kinase activity and molecular modeling study", Bioorganic Chemistry, 110 (2021) 104819, DOI: 10.1016/j.bioorg.2021.104819

27 A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik "Application of TD-DFT Theory to Studying Porphyrinoid-Based Photosensitizers for Photodynamic Therapy: A Review", Molecules, 26(23) (2021) 7176, DOI: 10.3390/molecules26237176

28 B. Dybiec, K. Capała, J. Barbasz "Physics of free climbing", Physical Review E, 103(6) (2021) 062135, DOI: 10.1103/PhysRevE.103.062135

29 K. Dymek, G. Kurowski, Ł. Kuterasiński, R. Jędrzejczyk, M. Szumera, M. Sitarz, A. Pajdak, Ł. Kurach, A. Boguszewska-Czubara, P.J. Jodłowski "In Search of Effective UiO-66 Metal–Organic Frameworks for Artificial Kidney Application", ACS Applied Materials & Interfaces, 13(38) (2021) 45149–45160, DOI: 10.1021/acsami.1c05972

30 K. Feliksiak, D. Solarz, M. Guzik, A. Zima, Z. Rajfur, T. Witko "Vimentin cytoskeleton architecture analysis on polylactide and polyhydroxyoctanoate substrates for cell culturing", International Journal of Molecular Sciences, 22(13) (2021) 6821, DOI: 10.3390/ijms22136821

31 J. Fiedor, M. Przetocki, A. Siniarski, G. Gajos, N. Spiridis, K. Freindl, K. Burda "β-Carotene-Induced Alterations in Haemoglobin Affinity to O_2", Antioxidants, 10(3) (2021) 451, DOI: 10.3390/antiox10030451

32 J. Fiedor, M. Przetocki, A. Siniarski, G. Gajos, N. Spiridis, K. Freindl, K. Burda "Interactions of β-carotene with red blood cells: Its regulatory role on hemoglobin functioning", Acta Physica Polonica A, 139(3) (2021) 283-287, DOI: 10.12693/APhysPolA.139.283

33 L.J. Fox, A. Slastanova, N. Taylor, M. Wlodek, O. Bikondoa, R.M. Richardson, W.H. Briscoe "Interactions between PAMAM dendrimers and DOPC lipid multilayers: Membrane thinning and structural disorder", Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects,1865 (4)(2021) art. no. 129542, DOI: 10.1016/j.bbagen.2020.129542

34 M. Gackowski, M. Paczwa "The Impact of Hydration and Dehydration on the Mobility and Location of Ibuprofen Molecules in the Voids of Ultra-Stable Zeolite Y", Materials, 14(24) (2021) 7823, DOI: 10.3390/ma14247823

35 M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, D. Duraczyńska, A. Hinz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz "The role of water in the confinement of ibuprofen in SBA-15", Journal of Materials Chemistry B, 9(36) (2021) 7482-7491, DOI: 10.1039/D1TB01498F

36 D. Gawel, J. Zawala "Stability of Liquid Films Formed by a Single Bubble and Droplet at Liquid/Gas and Liquid/Liquid Interfaces in Bovine Serum Albumin Solutions", ACS Omega, 6(28) (2021) 18289-18299, DOI: 10.1021/acsomega.1c02188

37 K. Gawlińska-Nęcek, M. Wlazło, R. Socha, I. Stefaniuk, Ł. Major, P. Panek "Influence of conditioning temperature on defects in the double Al_2O_3/ZnO layer deposited by the ALD method", Materials, 14(4) (2021) 1038, DOI: 10.3390/ma14041038

38 F. Genuzio, T. Giela, M. Lucian, T.O. Menteş, C.A. Brondin, G. Cautero, P. Mazalski, S. Bonetti, J. Korecki, A. Locatelli "A UHV MOKE magnetometer complementing XMCD-PEEM at the Elettra Synchrotron", Journal of synchrotron radiation, 28 (2021) 995-1005, DOI: 10.1107/S1600577521002885

39 A. Gibała, P. Żeliszewska , T. Gosiewski, A. Krawczyk, D. Duraczyńska, J. Szaleniec, M. Szaleniec, M. Oćwieja "Antibacterial and antifungal properties of silver nanoparticles—

effect of a surface-stabilizing agent", Biomolecules, 11(10) (2021) 1481, DOI: 10.3390/biom11101481

40 R. Gieniusz, P. Mazalski, U. Guzowska, I. Sveklo, J. Fassbender, A. Wawro, A. Maziewski "Dzyaloshinskii-Moriya interaction and magnetic anisotropy in Pt/Co/Au trilayers modified by Ga^+ ion irradiation", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 537 (2021) 168160, DOI: 10.1016/j.jmmm.2021.168160

41 B. Gieroba, G. Kalisz, A. Sroka-Bartnicka, A. Płazińska, W. Płaziński, M. Starek, M. Dabrowska "Molecular structure of cefuroxime axetil complexes with α-, β-, γ-, and 2-hydroxypropyl-β-cyclodextrins: Molecular simulations and raman spectroscopic and imaging studies", International Journal of Molecular Sciences, 22(10) (2021) 5238, DOI: 10.3390/ijms22105238

42 M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner, T. Borowski, D. Lupa, P. Mielczarek, M. Oszajca, K. Świderek, V. Moliner, A.J. Bojarski, M. Szaleniec "Enzymatic Δ1-Dehydrogenation of 3-Ketosteroids—Reconciliation of Kinetic Isotope Effects with the Reaction Mechanism", ACS Catalysis, 11 (2021) 8211-8225, DOI: 10.1021/acscatal.1c01479

43 M. Głąb, A. Drabczyk, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan, B. Tyliszczak "Physicochemical Characteristics of Chitosan-Based Hydrogels Modified with Equisetum arvense L. (Horsetail) Extract in View of Their Usefulness as Innovative Dressing Materials", Materials, 14(24) (2021) 7533, DOI: 10.3390/ma14247533

44 G.G. Gochev, V.I. Kovalchuk, E.V. Aksenenko, V.B. Fainerman, R. Miller "β-lactoglobulin adsorption layers at thewater/air surface: 5. adsorption isotherm and equation of state revisited, impact of pH", Colloids and Interfaces, 5 (1) (2021) 3, DOI: 10.3390/colloids5010014

45 A. González Guillén, M. Oszajca, W. Łasocha "Synthesis, characterization and thermal properties of organic-inorganic hybrid layered materials based on metal sulfates and aromatic diamines: $M(diamine)_xSO_4$, (M = Fe, Co; x = 1, 2)", Polyhedron, 206 (2021) 115319, DOI: 10.1016/j.poly.2021.115319

46 P. Gospodarič, E. Młyńczak, I. Soldatov, A. Kákay, D.E. Bürgler, L. Plucinski, R. Schäfer, J. Fassbender, C.M. Schneider "Multistate current-induced magnetization switching in Au/Fe/MgO(001) epitaxial heterostructures", Physical Review Research, 3(2) (2021) 023089, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.023089

47 W. Grzebieniarz, N. Nowak, G. Khachatryan, M. Krzan, M. Krystyjan, J. Kosiński, K. Khachatryan "The Preparation and Characterization of Quantum Dots in Polysaccharide Carriers (Starch/Chitosan) as Elements of Smart Packaging and Their Impact on the Growth of Microorganisms in Food", Materials, 14(24) (2021) 7732, DOI: 10.3390/ma14247732

48 W. Guziewicz, A. Białas, B.D. Napruszewska, M. Zimowska, J. Gurgul "Aluminum Doped Titania as a Support of Copper Catalysts for SCR of Nitrogen Oxides", Materials, 14 (2021) 6021, DOI: 10.3390/ma14206021

49 M.W. Guzik "Polyhydroxyalkanoates, bacterially synthesized polymers, as a source of chemical compounds for the synthesis of advanced materials and bioactive molecules", Applied Microbiology and Biotechnology, 105(20) (2021) 7555-7566, DOI: 10.1007/s00253-021-11589-0

50 M.W. Guzik, T. Nitkiewicz, M. Wojnarowska, M. Sołtysik, S.T. Kenny, R.P. Babu, M. Best, K.E. O'Connor "Robust process for high yield conversion of non-degradable polyethylene to

a biodegradable plastic using a chemo-biotechnological approach", Waste Management, 135 (2021) 60-69, DOI: 10.1016/j.wasman.2021.08.030

51 Ł. Hamryszak, M. Kulawska, M. Madej-Lachowska, M. Śliwa, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk "Copper Tricomponent Catalysts Application for Hydrogen Production from Ethanol", Catalysts, 11(5) (2021) 575, DOI: 10.3390/catal11050575

52 S. Harizanova, E. Faulques, B. Corraze, C. Payen, M. Zając, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, G. Atanasova, R. Stoyanova "Composites between Perovskite and Layered Co-Based Oxides for Modification of the Thermoelectric Efficiency", Materials, 14(22) (2021) 7019, DOI: 10.3390/ma14227019

53 A. Jagusiak, J. Goclon, T. Panczyk "Adsorption of Evans blue and Congo red on carbon nanotubes and its influence on the fracture parameters of defective and functionalized carbon nanotubes studied using computational methods", Applied Surface Science, 539 (2021) 148236, DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.148236

54 A. Jamrozik, J. Przewoznik, S. Krysiak , J. Korecki, G. Trykowski, A. Małolepszy, L. Stobiński, K. Burda "Effect of grinding and the mill type on magnetic properties of carboxylated multiwall carbon nanotubes", Materials, 14(14) (2021) 4057, DOI: 10.3390/ma14144057

55 E. Jamróz, A. Cabaj, L. Juszczak, J. Tkaczewska, M. Zimowska, A. Cholewa-Wójcik, P. Krzyściak, P. Kopel "Active Double-Layered Films Enriched with AgNPs in Great Water Dock Root and Pu-Erh Extracts", Materials, 14(22) (2021) 6925, DOI: 10.3390/ma14226925

56 E. Jamróz, M. Janik, L. Juszczak, T. Kruk, P. Kulawik, M. Szuwarzyński, A. Kawecka, K. Khachatryan "Composite biopolymer films based on a polyelectrolyte complex of furcellaran and chitosan", Carbohydrate Polymers, 274 (2021) 118627, DOI: 10.1016/j.carbpol.2021.118627

57 E. Jarek, Z. Krasińska-Krawet, T. Kruk, L. Lamch, S. Ronka, K.A. Wilk, P. Warszyński "Adsorption properties of soft hydrophobically functionalized PSS/MA polyelectrolytes", Colloids and Interfaces, 5 (1) (2021) 3, DOI: 10.3390/colloids5010003

58 P.J. Jodłowski, I. Czekaj, P. Stachurska, Ł. Kuterasiński, L. Chmielarz, R.J. Jędrzejczyk, P. Jeleń, M. Sitarz, S. Górecka, M. Mazur, I. Kurzydym "Experimental and theoretical studies of sonically prepared Cu–Y, Cu–USY and Cu–ZSM-5 catalysts for SCR deNOx", Catalysts, 11(7) (2021) 824, DOI: 10.3390/catal11070824

59 P.J. Jodłowski, G. Kurowski, L. Kuterasiński, M. Sitarz, P. Jeleń, J. Jaśkowska, A. Kołodziej, A. Pajdak, Z. Majka, A. Boguszewska-Czubara "Cracking the Chloroquine Conundrum: The Application of Defective UiO-66 Metal-Organic Framework Materials to Prevent the Onset of Heart Defects : The Vivo and in Vitro", ACS Applied Materials and Interfaces, 13 (1) (2021) 312-323, DOI: 10.1021/acsami.0c21508

60 R. Karcz, B.D. Napruszewska, A. Michalik, J. Kryściak-Czerwenka, D. Duraczyńska, E.M. Serwicka "Fine Crystalline Mg-Al Hydrotalcites as Catalysts for Baeyer-Villiger Oxidation of Cyclohexanone with H_2O_2", Catalysts, 11(12) (2021) 1493, DOI: 10.3390/catal11121493

61 A.A. Kasach, D.S. Kharytonau, A.V. Paspelau, J. Ryl, D.S. Sergievich, I.M. Zharskii, I.I. Kurilo " Effect of TiO_2 Concentration on Microstructure and Properties of Composite Cu–Sn–TiO_2 Coatings Obtained by Electrodeposition", Materials, 14(20) (2021) 6179, DOI: 10.3390/ma14206179

62 K. Khachatryan, L. Khachatryan, M. Krzan, M. Krystyjan, L. Krzemińska-Fiedorowicz, A. Lenart-Boroń, A. Koronowicz, M. Drozdowska, G. Khachatryan "Formation and Investigation of Physicochemical, Biological and Bacteriostatic Properties of Nanocomposite Foils Containing Silver Nanoparticles and Graphene Oxide in Hyaluronic Acid Matrix", Materials, 14(12) (2021) 3377, DOI: 10.3390/ma14123377

63 D.S. Kharitonov, A.A. Kasach, A. Gibala, M. Zimowska , I.I. Kurilo, A. Wrzesinska, L. Szyk-Warszynska, P. Warszynski "Anodic electrodeposition of chitosan–AgNP composites using in situ coordination with copper ions", Materials, 14(11) (2021) 2754, DOI: 10.3390/ma14112754

64 D.S. Kharitonov, A.A. Kasach, D.S. Sergievich , A. Wrzesińska, I. Bobowska, K. Darowicki, A. Zielinski, J. Ryl, I.I. Kurilo "Ultrasonic-assisted electrodeposition of Cu-Sn-TiO_2 nanocomposite coatings with enhanced antibacterial activity", Ultrasonics Sonochemistry, 75 (2021) 105593, DOI: 10.1016/j.ultsonch.2021.105593

65 D.S. Kharitonov, M. Zimowska, J. Ryl, A. Zieliński, M.A. Osipenko, J. Adamiec, A. Wrzesińska, P.M. Claesson, I.I. Kurilo "Aqueous molybdate provides effective corrosion inhibition of WE43 magnesium alloy in sodium chloride solutions", Corrosion Science, 190 (2021) 109664, DOI: 10.1016/j.corsci.2021.109664

66 K. Khivantsev, R.N. Jaegers, H.A. Aleksandrov, L. Kovarik, M.A. Derewinski, Y. Wang, G.N. Vayssilov, J. Szanyi "Biomimetic CO oxidation below −100 °C by a nitrate-containing metal-free microporous system", Nature Communications, 12 (2021) 6033, DOI: 10.1038/s41467-021-26157-3

67 K. Khivantsev, N.R. Jaegers, L. Kovarik, M. Wang, J.Z. Hu, Y. Wang, M.A. Derewinski, J. Szanyi "The superior hydrothermal stability of Pd/SSZ-39 in low temperature passive NOx adsorption (PNA) and methane combustion", Applied Catalysis B: Environmental, 280 (2021) 119449, DOI: 10.1016/j.apcatb.2020.119449

68 B. Klebowski, M. Stec, J. Depciuch, A. Gałuszka, A. Pajor-Swierzy, J. Baran, M. Parlinska-Wojtan "Gold-Decorated Platinum and Palladium Nanoparticles as Modern Nanocomplexes to Improve the Effectiveness of Simulated Anticancer Proton Therapy", Pharmaceutics, 13(10) (2021) 1726, DOI: 10.3390/pharmaceutics13101726

69 A.I. Klyndyuk, M. Mosiałek, D.S. Kharitonov, E.A. Chizhova, M. Zimowska, R.P. Socha, A. Komenda "Structural and electrochemical characterization of $YBa(Fe,Co,Cu)_2O_{5+\delta}$ layered perovskites as cathode materials for solid oxide fuel cells", International Journal of Hydrogen Energy, 46 (32) (2021) 16977-16988, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2021.01.141

70 P. Komorek, B. Jachimska, I. Brand "Adsorption of lysozyme on gold surfaces in the presence of an external electric potential", Bioelectrochemistry, 142 (2021) 107946, DOI: 10.1016/j.bioelechem.2021.107946

71 P. Komorek, E. Martin, B. Jachimska "Adsorption and conformation behavior of lysozyme on a gold surface determined by QCM-D, MP-SPR, and FTIR", International Journal of Molecular Sciences, 22(3) (2021) 1322, DOI: 10.3390/ijms22031322

72 T. Kruk, M. Bzowska, A. Hinz, M. Szuwarzyński, K. Szczepanowicz "Control of Specific/Nonspecific Protein Adsorption: Functionalization of Polyelectrolyte Multilayer Films as a Potential Coating for Biosensors", Materials, 14(24) (2021) 7629, DOI: 10.3390/ma14247629

73 T. Kruk, P. Warszyński "Conductive nanofilms with oppositely charged reduced graphene oxides as a base for electroactive coatings and sensors", Colloids and Interfaces, 5(2) (2021) 20, DOI: 10.3390/colloids5020020

74 M. Krystyjan, G. Khachatryan, M. Grabacka, M. Krzan, M. Witczak, J. Grzyb, L. Woszczak "Physicochemical, bacteriostatic, and biological properties of starch/chitosan polymer composites modified by graphene oxide, designed as new bionanomaterials", Polymers, 13(14) (2021) 2327, DOI: 10.3390/polym13142327

75 S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Głąb, A. Drabczyk, A. Kordyka, M. Godzierz, P.S. Wróbel, M. Krzan, M. Uthayakumar, M. Kędzierska, B. Tyliszczak "Physicochemical characteristics of chitosan-based hydrogels containing albumin particles and aloe vera juice as transdermal systems functionalized in the viewpoint of potential biomedical applications", Materials, 14(19) (2021) 5832, DOI: 10.3390/ma14195832

76 A. Kurek, E. Kłosowicz, K. Sofińska, R. Jach, J. Barbasz "Methods for Studying Endometrial Pathology and the Potential of Atomic Force Microscopy in the Research of Endometrium", Cells, 10(2) (2021) 219, DOI: 10.3390/cells10020219

77 K. Kurpiewska, E. Kot, T. Borowski "Seven quick tips for beginners in protein crystallography", Acta Biochimica Polonica, 68(4) (2021) 535-546, DOI: 10.18388/abp.2020_5589

78 Ł. Kuterasiński, U. Filek, M. Gackowski, M. Zimowska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, P.J. Jodłowski "Sonochemically prepared hierarchical MFI-type zeolites as active catalysts for catalytic ethanol dehydration", Ultrasonics Sonochemistry, 74 (2021) 105581, DOI: 10.1016/j.ultsonch.2021.105581

79 Ł. Kuterasiński, M. Gackowski, J. Podobiński, D. Rutkowska-Żbik, J. Datka "Nitrogen as a Probe Molecule for the IR Studies of the Heterogeneity of OH Groups in Zeolites", Molecules, 26 (2021) 6261, DOI: 10.3390/molecules26206261

80 Ł. Kuterasiński, J. Podobiński, J. Datka "Oxidation of Ethanol in Cu-Faujasites Studied by IR Spectroscopy", Molecules, 26 (9) (2021) 2669, DOI: 10.3390/molecules26092669

81 Ł. Kuterasiński, M. Smoliło-Utrata, J. Kaim, W. Rojek, J. Podobiński, K. Samson, D. Duraczyńska, M. Zimowska, M. Gackowski, D. Rutkowska-Zbik "On the Role of Protonic Acid Sites in Cu Loaded FAU31 Zeolite as a Catalyst for the Catalytic Transformation of Furfural to Furan", Molecules, 26 (7) (2021) 2015, DOI: 10.3390/molecules26072015

82 E. Lalik, K. Drużbicki, G. Irvine, M. Gutmann, S. Rudić, P. Manuel, V. Petříček, M. Krzystyniak "Interplay between Local Structure and Nuclear Dynamics in Tungstic Acid: A Neutron Scattering Study", Journal of Physical Chemistry C, 125(43) (2021) 23864-23879, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c05121

83 S.M. Lalwani, P. Batys, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus "Relaxation Times of Solid-like Polyelectrolyte Complexes of Varying pH and Water Content", Macromolecules, 54(17) (2021) 7765-7776, DOI: 10.1021/acs.macromol.1c00940

84 G. Lewińska, P. Jeleń, J. Kanak, Ł. Walczak, R. Socha, M. Sitarz, J. Sanetra, K.W. Marszałek "Investigation of Dye Dopant Influence on Electrooptical and Morphology Properties of Polymeric Acceptor Matrix Dedicated for Ternary Organic Solar Cells", Polymers, 13(23) (2021) 4099, DOI: 10.3390/polym13234099

85 D. Lupa, M. Oćwieja, Z. Adamczyk "Hematite/Polystyrene Raspberry-Like Microcomposites as Stable Support for Silver Nanoparticle Immobilization", Particle and Particle Systems Characterization, 38 (2) (2021) 2000239, DOI: 10.1002/ppsc.202000239

86 V. Lutsyk, W. Plazinski "Conformational Properties of Glycosaminoglycan Disaccharides: A Molecular Dynamics Study", Journal of Physical Chemistry B, 125(39) (2021) 10900-10916, DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c04860

87 A. Maciej, A. Wadas, M. Sowa, R. Socha, M. Kubiczek, W. Simka "Colourful thin passive films on a Zn-Co alloy formed by anodic oxidation", Electrochimica Acta, 373 (2021) 137922, DOI: 10.1016/j.electacta.2021.137922

88 P. Mazalski, L. Ohnoutek, I. Sveklo, L. Beran, Z. Kurant, W. Powroźnik, A. Wawro, M.O. Liedke, M. Butterling, A. Wagner, J. Fassbender, J. Hamrle, R. Antoš, V. Kletecka, M. Veis, A. Maziewski "Ultrathin Co films with Pt and Au covers - Magnetic and structural properties driven by Ga^+ ion irradiation", New Journal of Physics, 23 (2) (2021) 23015, DOI: 10.1088/1367-2630/abde6d

89 A. Micek-Ilnicka, N. Ogrodowicz, U. Filek, A. Kusior "The role of TiO_2 polymorphs as support for the Keggin-type tungstophosphoric heteropolyacid as catalysts for n-butanol dehydration", Catalysis Today, 380 (2021) 84-92, DOI: 10.1016/j.cattod.2021.04.021

90 A. Michna, J. Maciejewska-Prończuk, A. Pomorska, M. Wasilewska, T. Kilicer, J. Witt, O. Ozcan "Effect of the Anchoring Layer and Transport Type on the Adsorption Kinetics of Lambda Carrageenan", Journal of Physical Chemistry B, 125 (2021) 7797-7808, DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c03550

91 A. Michna, W. Płaziński, D. Lupa, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Carrageenan molecule conformations and electrokinetic properties in electrolyte solutions: Modeling and experimental measurements", Food Hydrocolloids, 121 (2021) 107033, DOI: 10.1016/j.foodhyd.2021.107033

92 Z. Miłosz, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, N. Spiridis, S. Jurga, F. Stobiecki, M. Lewandowski "Graphene Blocks Oxidative Segregation of Iron Dissolved in Platinum: A Model Study", Advanced Materials Interfaces, 8 (9) (2021) 2002172, DOI: 10.1002/admi.202002172

93 E. Młyńczak, I. Aguilera, P. Gospodarič, T. Heider, M. Jugovac, G. Zamborlini, C. Tusche, S. Suga, V. Feyer, S. Blügel, L. Plucinski, C.M. Schneider "Spin-polarized quantized electronic structure of Fe(001) with symmetry breaking due to the magnetization direction", Physical Review B, 103 (3) (2021) 035134, DOI: 10.1103/PhysRevB.103.035134

94 B. Mrugała, A. Miłaczewska, P.J. Porebski, E. Niedzialkowska, M. Guzik, W. Minor, T. Borowski "A study on the structure, mechanism, and biochemistry of kanamycin B dioxygenase (KanJ)—an enzyme with a broad range of substrates", FEBS Journal, 288 (4) (2021) 1366-1386, DOI: 10.1111/febs.15462

95 M. Musztyfaga-Staszuk, D. Pudiš, R. Socha, K. Gawlińska-Nęcek, P. Panek "Optimised magnetron sputtering method for the deposition of indium tin oxide layers", Bulletin of the Polish Academy of Sciences: Technical Sciences, 69(9) (2021) e139005, DOI: 10.24425/bpasts.2021.139005

96 M. Nattich-Rak, A. Pomorska, P. Batys, Z. Adamczyk "Adsorption kinetic of myoglobin on mica and silica – Role of electrostatic interactions", Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 198 (2021) 111436, DOI: 10.1016/j.colsurfb.2020.111436

97 J. Nieszporek, T. Pańczyk, K. Nieszporek "Molecular dynamics analysis of stabilities of transitional hydrogen bonds in sulfate aqueous solution", Bulletin of the Chemical Society of Japan, 94(5) (2021) 1491-1498, DOI: 10.1246/bcsj.20210021

98 B.A. Noskov, N.A. Isakov , G. Gochev, G. Loglio, R. Miller "Interaction of fullerene C60 with bovine serum albumin at the water – air interface", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 631 (2021) 127702, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2021.127702

99 A. Nowak, J. Żur-Pińska, A. Piński, G. Pacek, A. Mrozik "Adaptation of phenol-degrading *Pseudomonas putida* KB3 to suboptimal growth condition: A focus on degradative rate,

membrane properties and expression of *xylE* and *cfaB* genes", Ecotoxicology and Environmental Safety, 221 (2021) 112431, DOI: 10.1016/j.ecoenv.2021.112431

100 N. Nowak, W. Grzebieniarz, G. Khachatryan, K. Khachatryan, A. Konieczna-Molenda, M. Krzan, J. Grzyb "Synthesis of silver and gold nanoparticles in sodium alginate matrix enriched with graphene oxide and investigation of properties of the obtained thin films", Applied Sciences, 11 (9) (2021) 3857, DOI: 10.3390/app11093857

101 J.E. Olszowka, M. Lemishka, K. Mlekodaj, P. Kubat, D. Rutkowska-Żbik, J. Dedecek, E. Tabor "Determination of Zn Speciation, Siting, and Distribution in Ferrierite Using Luminescence and FTIR Spectroscopy", Journal of Physical Chemistry C, 125(17) (2021) 9060-9073, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c00543

102 Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Zbik, R. van Eldik, L. Fiedor, G. Stochel "Chlorophyll a π-Cation Radical as Redox Mediator in Superoxide Dismutase (SOD) Mimetics", ChemPhysChem, 22 (4) (2021) 344-348, DOI: 10.1002/cphc.202000777

103 M.A. Osipenko, D.S. Kharitonov, I.V. Makarova, V.I. Romanovsky, I.I. Kurilo "Corrosion Behavior of Modified Anodic Oxide Coatings on AD31 Aluminium Alloy", Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces, 57(3) (2021) 550-558, DOI: 10.1134/S2070205121030175

104 M. Paczkowska-Walendowska, N. Rosiak, E. Tykarska, K. Michalska, A. Płazińska, W. Płaziński, D. Szymanowska, J. Cielecka-Piontek "Tedizolid-cyclodextrin system as delayed-release drug delivery with antibacterial activity", International Journal of Molecular Sciences, 22 (1) (2021) 115, DOI: 10.3390/ijms22010115

105 A. Pajor-Świerzy, D. Stásko, R. Pawlowski, G. Mordarski, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "Polydispersity vs. monodispersity. How the properties of Ni-Ag core-shell nanoparticles affect the conductivity of ink coatings", Materials, 14(9) (2021) 2304, DOI: 10.3390/ma14092304

106 A. Pajor-Świerzy, F. Szendera, R. Pawłowski, K. Szczepanowicz "Nanocomposite inks based on nickel-silver core-shell and silver nanoparticles for fabrication conductive coatings at low-temperature sintering", Colloids and Interfaces, 5 (1) (2021) 15, DOI: 10.3390/colloids5010015

107 H. Pálková, M. Barlog, J. Madejová, V. Hronský, L. Petra, E. Šimon, P. Billik, M. Zimowska "Structural changes in smectites subjected to mechanochemical activation: The effect of the occupancy of the octahedral sites", Applied Clay Science, 213 (2021) 106214, DOI: 10.1016/j.clay.2021.106214

108 K. Pamin, J. Gurgul, G. Mordarski, Y. Millot, J.-P. Nogier, L. Valentin, S. Dzwigaj "Efficient transformation of cyclohexanone to ε-caprolactone in the oxygen-aldehyde system over single-site titanium BEA zeolite", Microporous and Mesoporous Materials, 322 (2021) 111159, DOI: 10.1016/j.micromeso.2021.111159

109 T. Panczyk, P.J. Camp "Lorentz forces induced by a static magnetic field have negligible effects on results from classical molecular dynamics simulations of aqueous solutions", Journal of Molecular Liquids, 330 (2021) 115701, DOI: 10.1016/j.molliq.2021.115701

110 O. Pariiska, D. Mazur, Y. Kurys, R. Socha, V. Koshechko, V. Pokhodenko "Poly-5-aminoindole and graphene-like materials derived bifunctional Co–N-C electrocatalysts for oxygen reduction and hydrogen evolution", Journal of Solid State Electrochemistry, 25 (2021) 2309–2319, DOI: 10.1007/s10008-021-05009-6

111 A. Pawlik, M. Jarosz, R.P. Socha, G.D. Sulka "The Impacts of Crystalline Structure and Different Surface Functional Groups on Drug Release and the Osseointegration Process of Nanostructured TiO_2", Molecules, 26 (6) (2021) 1723, DOI: 10.3390/molecules26061723

112 M. Pekmezovic, M.K. Krusic, I. Malagurski, J. Milovanovic, K. Stępień, M. Guzik, R. Charifou, R. Babu, K. O'connor, J. Nikodinovic-Runic "Polyhydroxyalkanoate/antifungal polyene formulations with monomeric hydroxyalkanoic acids for improved antifungal efficiency", Antibiotics, 10(6) (2021) 737, DOI: 10.3390/antibiotics10060737

113 P.M. Pieczywek, J. Cieśla, W. Płaziński, A. Zdunek "Aggregation and weak gel formation by pectic polysaccharide homogalacturonan", Carbohydrate Polymers, 256 (2021) 117566, DOI: 10.1016/j.carbpol.2020.117566

114 N. Piergies, M. Oćwieja, C. Paluszkiewicz, W.M. Kwiatek "Nanoparticle stabilizer as a determining factor of the drug/gold surface interaction: SERS and AFM-SEIRA studies", Applied Surface Science, 537 (2021) 147897 (1-10), DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.147897

115 I.S. Pieta, A. Lewalska-Graczyk, P. Kowalik, K. Antoniak-Jurak, M. Krysa, A. Sroka-Bartnicka, A. Gajek, W. Lisowski, D. Mrdenovic, P. Pieta, R. Nowakowski, A. Lew, E.M. Serwicka "CO_2 hydrogenation to methane over Ni-catalysts: The effect of support and vanadia promoting", Catalysts, 11 (4) (2021) 433, DOI: 10.3390/catal11040433

116 I.S. Pieta, A. Michalik, E. Kraleva, D. Mrdenovic, A. Sek, E. Wahaczyk, A. Lewalska-Graczyk, M. Krysa, A. Sroka-Bartnicka, P. Pieta, R. Nowakowski, A. Lew, E.M. Serwicka "Bio-DEE synthesis and dehydrogenation coupling of bio-ethanol to bio-butanol over multicomponent mixed metal oxide catalysts", Catalysts, 11(6) (2021) 660, DOI: 10.3390/catal11060660

117 E. Piktel, Ł. Suprewicz, J. Depciuch, S. Chmielewska, K. Skłodowski, T. Daniluk, G. Król, P. Kołat-Brodecka, P. Bijak, A. Pajor-Świerzy, K. Fiedoruk, M. Parlinska-Wojtan, R. Bucki "Varied-shaped gold nanoparticles with nanogram killing efficiency as potential antimicrobial surface coatings for the medical devices", Scientific Reports, 11(1) (2021) 12546, DOI: 10.1038/s41598-021-91847-3

118 A. Pluta-Kubica, E. Jamróz, L. Juszczak, P. Krzyściak, M. Zimowska "Characterization of Furcellaran-Whey Protein Isolate Films with Green Tea or Pu-erh Extracts and Their Application as Packaging of an Acid-Curd Cheese", Food and Bioprocess Technology, 14 (2021) 78-92, DOI: 10.1007/s11947-020-02570-2

119 A. Plazinska, W. Plazinski "Comparison of Carbohydrate Force Fields in Molecular Dynamics Simulations of Protein-Carbohydrate Complexes", Journal of Chemical Theory and Computation, 17(4) (2021) 2575-2585, DOI: 10.1021/acs.jctc.1c00071

120 W. Plazinski, M.U. Roslund, E. Säwén, O. Engström, P. Tähtinen, G. Widmalm "Tautomers of: N -acetyl-d-allosamine: An NMR and computational chemistry study", Organic and Biomolecular Chemistry, 19(33) (2021) 7190-7201, DOI: 10.1039/d1ob01139a

121 E. Pociecha, A. Gorczyca, M. Dziurka, E. Matras, M. Oćwieja "Silver nanoparticles and silver ions differentially affect the phytohormone balance and yield in wheat", Agriculture (Switzerland), 11(8) (2021) 729, DOI: 10.3390/agriculture11080729

122 J. Podobiński, M. Gackowski, G. Mordarski, K. Samson, M. Śliwa, D. Rutkowska-Zbik, J. Datka "The properties of Cu ions in zeolites CuY studied by IR spectroscopy", Molecules, 26(15) (2021) 4686, DOI: 10.3390/molecules26154686

123 D. Porębska, Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel, R. van Eldik "Ligand-tuning of the stability of Pd(II) conjugates with cyanocobalamin", International Journal of Molecular Sciences, 22(15) (2021) 7973, DOI: 10.3390/ijms22157973

124 S. Pote, S. Kachhap, N.J. Mank, L. Daneshian, V. Klapper, S. Pye, A.K. Arnette, L.S. Shimizu, T. Borowski, M. Chruszcz "Comparative structural and mechanistic studies of 4-hydroxy-

tetrahydrodipicolinate reductases from Mycobacterium tuberculosis and Vibrio vulnificus", Biochimica et Biophysica Acta - General Subjects, 1865 (1) (2021) 129750, DOI: 10.1016/j.bbagen.2020.129750

125 A.V. Pyanko, I.V. Makarova, D.S. Kharitonov, I.S. Makeeva, D.S. Sergievich, A.A. Chernik "Physicochemical and Biocidal Properties of Nickel–Tin and Nickel–Tin—Titania Coatings", Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces, 57 (1) (2021) 88-95, DOI: 10.1134/S2070205121010160

126 J.M. Rae, B. Jachimska "Analysis of dendrimer-protein interactions and their implications on potential applications of dendrimers in nanomedicine", Nanoscale, 13 (40) (2021) 2703-2713, DOI: 10.1039/d0nr07607d

127 K. Rydel-Ciszek, T. Pacześniak, A. Miłaczewska, P. Chmielarz, A. Sobkowiak "'Oxygen-Consuming Complexes'–Catalytic Effects of Iron–Salen Complexes with Dioxygen", Catalysts, 11(12) (2021) 1462, DOI: 10.3390/catal11121462

128 M. Sadowska, M. Cieśla, Z. Adamczyk "Nanoparticle deposition on heterogeneous surfaces: Random sequential adsorption modeling and experiments", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 611 (2021) 126296, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2021.126296

129 I. Salii, M. Szaleniec, A. Alhaj Zein, D. Seyhan, A. Sekuła, K. Schühle, I. Kaplieva-Dudek, U. Linne, R. U. Meckenstock, J. Heider "Determinants for Substrate Recognition in the Glycyl Radical Enzyme Benzylsuccinate Synthase Revealed by Targeted Mutagenesis", ACS Catalysis, 11 (2021) 3361-3370, DOI: 10.1021/acscatal.0c04954

130 E. Scoppola, G.G. Gochev, J. Drnec, L. Pithan, D. Novikov, E. Schneck "Investigating the Conformation of Surface-Adsorbed Proteins with Standing-Wave X-ray Fluorescence", Biomacromolecules, 22(12) (2021) 5195–5203, DOI: 10.1021/acs.biomac.1c01136

131 E.M. Serwicka "Titania-clay mineral composites for environmental catalysis and photocatalysis", Catalysts, 11(9) (2021) 1087, DOI: 10.3390/catal11091087

132 S. Skibiński, E. Cichoń, K. Haraźna, E. Marcello, I. Roy, M. Witko, A. Ślósarczyk, J. Czechowska, M. Guzik, A. Zima "Functionalized tricalcium phosphate and poly(3-hydroxyoctanoate) derived composite scaffolds as platforms for the controlled release of diclofenac", Ceramics International, 47 (3) (2021) 3876-3883, DOI: 10.1016/j.ceramint.2020.09.248

133 K. Skowron, M. Wróbel, M. Mosiałek, L.L. Joncour, E. Dryzek "Gradient Microstructure Induced by Surface Mechanical Attrition Treatment in Grade 2 Titanium Studied Using Positron Annihilation Spectroscopy and Complementary Methods" Materials, 14(21) (2021) 6347, DOI: 10.3390/ma14216347

134 W. Snoch, D. Wnuk, T. Witko, J. Staroń, A.J. Bojarski, E. Jarek, F.J. Plou, M. Guzik "In Search of Effective Anticancer Agents-Novel Sugar Esters Based on Polyhydroxyalkanoate Monomers", International Journal of Molecular Sciences, 22(13) (2021) 7238, DOI: 10.3390/ijms22137238

135 K. Sofińska, J. Barbasz, M. Ciesla, A. Wawrzkiewicz-Jalowiecka, E. Gudowska-Nowak "Qualitative Description of Detachment Forces for Macromolecules", Macromolecules, 54(16) (2021) 7377-7387, DOI: 10.1021/acs.macromol.1c00474

136 Z. Starowicz, K. Gawlińska – Nęcek, R.P. Socha, T. Płociński, J. Zdunek, M.J. Szczerba, P. Panek "Materials studies of copper oxides obtained by low temperature oxidation of copper

sheets", Materials Science in Semiconductor Processing, 121 (2021) 105368, DOI: 10.1016/j.mssp.2020.105368

137 A. Stasiłowicz, N. Rosiak, E. Tykarska, M. Kozak, J. Jenczyk, P. Szulc, J. Kobus-Cisowska, K. Lewandowska, A. Płazińska, W. Płaziński, J. Cielecka-Piontek "Combinations of piperine with hydroxypropyl-β-cyclodextrin as a multifunctional system", International Journal of Molecular Sciences, 22 (8) (2021) 4195, DOI: 10.3390/ijms22084195

138 R. Studzińska, D. Kupczyk, W. Płaziński, S. Baumgart, R. Bilski, R. Paprocka, R. Kołodziejska "Novel 2-(Adamantan-1-ylamino)thiazol-4(5H)-one derivatives and their inhibitory activity towards 11β-HSD1—synthesis, molecular docking and in vitro studies", International Journal of Molecular Sciences, 22(16) (2021) 8609, DOI: 10.3390/ijms22168609

139 J. Szaleniec, A. Gibała, P. Hartwich, K. Hydzik-Sobocińska, M. Konior, T. Gosiewski, M. Szaleniec "Challenging the gold standard: methods of sampling for microbial culture in patients with chronic rhinosinusitis", European Archives of Oto-Rhino-Laryngology, 278 (2021) 4795-4803, DOI: 10.1007/s00405-021-06747-z

140 M. Szczęch, A. Hinz, N. Łopuszyńska, M. Bzowska, W.P. Węglarz, K. Szczepanowicz "Polyaminoacid Based Core@shell Nanocarriers of 5-Fluorouracil: Synthesis, Properties and Theranostics Application", International Journal of Molecular Sciences, 22(23) (2021) 12762, DOI: 10.3390/ijms222312762

141 W. Szczęsna, M. Tsirigotis-Maniecka, L. Szyk-Warszyńska, S. Balicki, P. Warszyński, K.A. Wilk "Insight into multilayered alginate/chitosan microparticles for oral administration of large cranberry fruit extract", European Polymer Journal, 160 (2021) 110776, DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2021.110776

142 M. Szota, K. Reczyńska-Kolman, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska "Poly(Amidoamine) dendrimers as nanocarriers for 5-fluorouracil: Effectiveness of complex formation and cytotoxicity studies", International Journal of Molecular Sciences, 22(60) (2021) 11167, DOI: 10.3390/ijms222011167

143 T. Szumełda, A. Drelinkiewicz, R. Kosydar, J. Gurgul, D. Duraczyńska "Synthesis of carbon-supported bimetallic palladium-iridium catalysts by microemulsion: characterization and electrocatalytic properties", Journal of Materials Science, 56 (2021) 392-414, DOI: 10.1007/s10853-020-05277-z

144 M. Szuwarzyński, K. Wolski, T. Kruk, Sz. Zapotoczny "Macromolecular strategies for transporting electrons and excitation energy in ordered polymer layers", Progress in Polymer Science, 121 (2021) 101433, DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2021.101433

145 G.S. Szymanski, Y. Suzuki, T. Ohba, B. Sulikowski, K. Góra-Marek, K.A. Tarach, S. Koter, P. Kowalczyk, A. Ilnicka, M. Zięba, L. Echegoyen, A.P. Terzyk,inska Plonska-Brzezinska "Linking the Defective Structure of Boron-Doped Carbon Nano-Onions with Their Catalytic Properties: Experimental and Theoretical Studies", ACS Applied Materials & Interfaces, 13(43) (2021) 51628-51642, DOI: 10.1021/acsami.1c12126

146 M. Śliwa, K. Samson "Steam reforming of ethanol over copper-zirconia based catalysts doped with Mn, Ni, Ga", International Journal of Hydrogen Energy, 46 (1) (2021) 555-564, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.09.222

147 M. Tatarczak-Michalewska, J. Flieger, J. Kawka, W. Płaziński, T. Klepka, P. Flieger, M. Szymańska-Chargot "Polymers sorption properties towards photosynthetic pigments and fungicides", Materials, 14 (8) (2021) 1874, DOI: 10.3390/ma14081874

148 M. Tsirigotis-Maniecka, L. Szyk-Warszyńska, Ł. Lamch, J. Weżgowiec, P. Warszyński, K.A. Wilk "Benefits of pH-responsive polyelectrolyte coatings for carboxymethyl cellulose-based microparticles in the controlled release of esculin", Materials Science and Engineering C, 118 (2021) 111397, DOI: 10.1016/j.msec.2020.111397

149 M. Tsirigotis-Maniecka, L. Szyk-Warszyńska, Ł. Maniecki, W. Szczęsna, P. Warszyński, K.A. Wilk "Tailoring the composition of hydrogel particles for the controlled delivery of phytopharmaceuticals", European Polymer Journal, 151 (2021) 110429, DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2021.110429

150 D. Ungor, A. Barbasz, A. Czyżowska, E. Csapó, M. Oćwieja "Cytotoxicity studies of protein-stabilized fluorescent gold nanoclusters on human lymphocytes", Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 200 (2021) 111593, DOI: 10.1016/j.colsurfb.2021.111593

151 L. Vaculíková, V. Valovičová, E. Plevová, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, R. Karcz, E.M. Serwicka "Synthesis, characterization and catalytic activity of cryptomelane/montmorillonite composites", Applied Clay Science, 202 (2021) 105977, DOI: 10.1016/j.clay.2021.105977

152 M. Wasilewska, M. Nattich-Rak, A. Pomorska, Z. Adamczyk "Mechanism of myoglobin molecule adsorption on silica: QCM, OWLS and AFM investigations", International Journal of Environmental Research and Public Health, 18 (9) (2021) 4944, DOI: 10.3390/ijerph18094944

153 P. Weroński, K. Pałka "Toward automatic analysis of random monolayers: The effect of pair correlation", Measurement: Journal of the International Measurement Confederation, 179 (2021) 109536, DOI: 10.1016/j.measurement.2021.109536

154 A. Wiertel-Pochopien, P. Batys, J. Zawala, P.B. Kowalczuk "Synergistic Effect of Binary Surfactant Mixtures in Two-Phase and Three-Phase Systems", Journal of Physical Chemistry B, 125 (15) (2021) 3855-3866, DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c00664

155 A. Wiertel-Pochopien, D. Kosior, J. Zawala "Effect of dynamic adsorption layer over colliding bubble on rate of solid surface dewetting in cationic surfactant solutions", Minerals Engineering, 165 (2021) 106850, DOI: 10.1016/j.mineng.2021.106850

156 T. Witko, Z. Baster, Z. Rajfur, K. Sofińska, J. Barbasz "Increasing AFM colloidal probe accuracy by optical tweezers", Scientific Reports, 11 (1) (2021) 509, DOI: 10.1038/s41598-020-79938-z

157 Z. Wojdyla, T. Borowski "Enzyme Multifunctionality by Control of Substrate Positioning Within the Catalytic Cycle—A QM/MM Study of Clavaminic Acid Synthase", Chemistry - A European Journal, 27 (6) (2021) 2196-2211, DOI: 10.1002/chem.202004426

158 M. Wojnicki, M. Luty-Błocho, P. Kwolek, M. Gajewska, R.P. Socha, Z. Pędzich, E. Csapó, V. Hessel "The influence of dielectric permittivity of water on the shape of PtNPs synthesized in high-pressure high-temperature microwave reactor", Scientific Reports, 11 (1) (2021) 4851, DOI: 10.1038/s41598-021-84388-2

159 P. Wojton, P. Wolski, K. Wolinski, T. Panczyk "Protonation of Cytosine-Rich Telomeric DNA Fragments by Carboxylated Carbon Nanotubes: Insights from Computational Studies", Journal of Physical Chemistry B, 125(21) (2021) 5526-5536, DOI: 10.1021/acs.jpcb.1c01393

160 P. Wojtoń, M. Szaniawska, L. Hołysz, R. Miller, A. Szcześ "Surface activity of natural surfactants extracted from Sapindus mukorossi and Sapindus trifoliatus soapnuts", Colloids and Interfaces, 5 (1) (2021) 7, DOI: 10.3390/colloids5010007

161 P. Wolski "Molecular Dynamics Simulations of the pH-Dependent Adsorption of Doxorubicin on Carbon Quantum Dots", Molecular Pharmaceutics, 18 (1) (2021) 257-266, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.0c00895

162 P. Wolski, K. Nieszporek, T. Panczyk "Cytosine-rich dna fragments covalently bound to carbon nanotube as factors triggering doxorubicin release at acidic ph. A molecular dynamics study", International Journal of Molecular Sciences, 22(16) (2021) 8466, DOI: 10.3390/ijms22168466

163 P. Wójcik, M. Glanowski, A.M. Wojtkiewicz, A. Rohman, M. Szaleniec "Universal capability of 3-ketosteroid Δ1-dehydrogenases to catalyze Δ1-dehydrogenation of C17-substituted steroids", Microbial Cell Factories, 20(1) (2021) 119, DOI: 10.1186/s12934-021-01611-5

164 A. Wójcik-Augustyn, A.J. Johansson, T. Borowski "Reaction mechanism catalyzed by the dissimilatory adenosine 5′-phosphosulfate reductase. Adenosine 5′-monophosphate inhibitor and key role of arginine 317 in switching the course of catalysis", Biochimica et Biophysica Acta - Bioenergetics, 1862 (2021) 148333, DOI: 10.1016/j.bbabio.2020.148333

165 A. Wrzesińska, A. Khort, M. Witkowski, J. Szczytko, J. Ryl, J. Gurgul, D.S. Kharitonov, K. Łątka, T. Szumiata, A. Wypych-Puszkarz "Structural, electrical, and magnetic study of La-, Eu-, and Er- doped bismuth ferrite nanomaterials obtained by solution combustion synthesis", Scientific Reports, 11 (2021) 2746, DOI: 10.1038/s41598-021-01983-z

166 M. Zając, T. Giela, K. Freindl, K. Kollbek, J. Korecki, E. Madej, K. Pitala, A. Kozioł-Rachwał, M. Sikora, N. Spiridis, J. Stępień, A. Szkudlarek, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak "The first experimental results from the 04BM (PEEM/XAS) beamline at Solaris", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 492 (2021) 43-48, DOI: 10.1016/j.nimb.2020.12.024

167 D.E. Zakrzewska, M.H. Buszko, A.K. Krella, A. Komenda, G. Mordarski, R.P. Socha "Damage development on the surface of nickel coating in the initial period of erosion", Materials, 14(11) (2021) 3123, DOI: 10.3390/ma14113123

168 P. Żeliszewska, M. Wasilewska, M. Cieśla, Z. Adamczyk "Deposition of Polymer Particles with Fibrinogen Corona at Abiotic Surfaces under Flow Conditions", Molecules, 26 (2021) 6299, DOI: 10.3390/molecules26206299

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH SPOZA LISTY MEiN

1 A. Bratek-Skicki "Towards a new class of stimuli-responsive polymer-based materials – Recent advances and challenges", Applied Surface Science Advances, 4 (2021) 100068, DOI: 10.1016/j.apsadv.2021.100068

2 J. Van Lindt, A. Bratek-Skicki, P.N. Nguyen, D. Pakravan, L.F. Durán-Armenta, A. Tantos, R. Pancsa, L. Van Den Bosch, D. Maes, P. Tompa "A generic approach to study the kinetics of liquid–liquid phase separation under near-native conditions", Communications Biology, 4 (2021) 77, DOI: 10.1038/s42003-020-01596-8

POZOSTAŁE PUBLIKACJE NAUKOWE

1 Bertolin, M. Strojecki, L. De Ferri, G. Grottesi, A.M. Siani “Salt Contamination of Wooden Materials: The Case of Trondheim (Norway) Warehouses “ 12th International Conference on Structural Analysis of Historical Constructions SAHC 2021, P. Roca, L. Pelà and C. Molins (Eds.), Artes Gráficas Torres S.L., Cornellà de Llobregat. Pp. 791-801. ISBN: 978-84-123222-0-0

2 R. Frąckowiak, G. Para, Ł. Lamch, L. Szyk-Warszyńska, K.A. Wilk, P. Warszyński "Adsorpcja dwufunkcyjnych labilnych surfaktantów kationowych na granicy faz ciecz/gaz - opis za pomocą modelu kwazi-dwuwymiarowego elektrolitu", Wiadomości Chemiczne, 75(9-10) (2021) 1119-1155

3 V. Tokarová, S. Stiborová, P. Bělecký, A. Kašpárek, J.E. Olszowka "A magnetic hydrophobic sorbent for removal of oil products from water surface [Magnetický hydrofóbní sorbent pro odstraňování ropných produktů z vodní hladiny]", Waste Forum, 2 (2021) 86-96, (ISSN: 1804-0195) DOI: brak

4 N. Zabari "Analysis of craquelure patterns in historical paintings using image processing along with Neural Network algorithms", Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering, 11784 (2021) 1178408, DOI: 10.1117/12.2593982 (ISBN 978-1510644021)

PUBLIKACJE NAUKOWE Z ROKIEM WYDANIA 2022

1. A. Barbasz, A. Czyżowska, N. Piergies, M. Oćwieja "Design cytotoxicity: The effect of silver nanoparticles stabilized by selected antioxidants on melanoma cells", Journal of Applied Toxicology, (2022) , DOI: 10.1002/jat.4240

2. M. Glanowski, S. Kachhap, T. Borowski, M. Szaleniec "Model Setup and Procedures for Prediction of Enzyme Reaction Kinetics with QM-Only and QM:MM Approaches", Methods in Molecular Biology, 2385 (2022) 175-236, DOI: 10.1007/978-1-0716-1767-0_10

3. A. Gorczyca, E. Pociecha, J. Maciejewska-Prończuk, M. Kula-Maximenko, M. Oćwieja "Phytotoxicity of silver nanoparticles and silver ions toward common wheat", Surface Innovations, 10(1) (2022) 48-58, DOI: 10.1680/jsuin.20.00094

4. M.W. Guzik, G.F. Duane, S.T. Kenny, E. Casey, P. Mielcarek, M. Wojnarowska, K.E. O'Connor "A polyhydroxyalkanoates bioprocess improvement case study based on four fed-batch feeding strategies", Microbial Biotechnology, (2022) , DOI: 10.1111/1751-7915.13879

5. E. Jamróz, J.Tkaczewska, L. Juszczak, M. Zimowska, A. Kawecka, P. Krzyściak, M. Skóra "The influence of lingonberry extract on the properties of novel, double-layered biopolymer films based on furcellaran, CMC and a gelatin hydrolysate", Food Hydrocolloids, 124 (2022) 107334, DOI: 10.1016/j.foodhyd.2021.107334

6. A.I. Klyndyuk, E.A. Chizhova, D.S. Kharytonau, D.A. Medvedev "Layered Oxygen-Deficient Double Perovskites as Promising Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells", Materials, 15(1) (2022) 141, DOI: 10.3390/ma15010141

7. R. Kosydar, M. Kołodziej, E. Lalik, J. Gurgul, G. Mordarski, A. Drelinkiewicz "The role of hydrogen bronzes in the hydrogenation of polyfunctional reagents: cinnamaldehyde, furfural and 5-hydroxymethylfurfural over Pd/H_xWO_3 and Pd/H_xMoO_3 catalysts", International Journal of Hydrogen Energy, 47(4) (2022) 2347-2365, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2021.10.162

8. Ł. Kuterasiński, U. Filek, M. Zimowska, B.D. Napruszewska, M. Gackowski, P.J. Jodłowski "Ultrasonically prepared mesoporous zeolites with faujasite type structure as catalysts for the production of diethyl ether and ethylene from ethanol", Materials Research Bulletin, 147 (2022) 111652, DOI:10.1016/j.materresbull.2021.111652

9. A.M. Lenart-Boroń, P.M. Boroń, J.A. Prajsnar, M.W. Guzik, M.S. Żelazny, M.D. Pufelska, M.J. Chmiela "COVID-19 lockdown shows how much natural mountain regions are affected by heavy tourism", Science of The Total Environment, 806 (2022) 151355, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.151355

10. B. Michorczyk, J. Sikora, B. Kordon-Łapczyńska, D. Gaweł, I. Czekaj "Raw Biogas as Feedstock for the OCM Process", Catalysts, 12(1) (2022) 54, DOI: 10.3390/catal12010054
11. P. Niemiec, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Tungsten and Molybdenum Heteropolyanions with Different Central Ions—Correlation between Theory and Experiment", Molecules, 27(1) (2022) 187, DOI: 10.3390/molecules27010187
12. A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, P. Sobik, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "Effect of Oxalic Acid Treatment on Conductive Coatings Formed by Ni@Ag Core–Shell Nanoparticles", Materials 15(1) (2022) 305; DOI: 10.3390/ma15010305
13. A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz, A. Kamyshny, S. Magdassi "Metallic core-shell nanoparticles for conductive coatings and printing" Advances in Colloid and Interface Science, 299 (2022) 102578, DOI: 10.1016/j.cis.2021.102578
14. J. Rose, I. Brand, M. Bilstein-Schloemer, B. Jachimska, R.M. Twyman, D. Prüfer, G. Noll "The Ca^{2+} response of a smartforisome protein is dependent on polymerization", Protein Science, (2021) 1–11, DOI: 10.1002/pro.4256
15. A. Sławińska, M. Tyszka-Czochara, P. Serda, M. Oszajca, M. Ruggiero-Mikołajczyk, K. Pamin, R. Karcz, W. Łasocha "Newly-Obtained Two Organic-Inorganic Hybrid Compounds Based on Potassium Peroxidomolybdate and Dicarboxypyridinic Acid: Structure Determination, Catalytic Properties, and Cytotoxic Effects of Eight Peroxidomolybdates in Colon and Hepatic Cancer Cells", Materials, 15(1) (2022) 241, DOI: 10.3390/ma15010241
16. A. Zięba, K. Stan-Głowińska, P. Czaja, Ł. Rogal, J. Przewoenik, D. Duraczyńska, E.M. Serwicka, L. Lityńska-Dobrzyńska "Microstructure and Catalytic Activity of $Al_{13}Fe_4$ and $Al_{13}Co_4$ Melt-Spun Alloys", Microscopy and Microanalysis, (2022), DOI: 10.1017/S1431927621012320

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH POKONFERENCYJNYCH

1. A. Archała, A. Płazińska, W. Płaziński, "Does polymorphism of the β2-adrenergic receptor influence its interactions with lipid bilayer and G_s protein?" Book of abstracts X Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 3-5.09.2021, PTChM UMLub, Lublin 2021, P56 str. 105
2. S. Balicki, Ł. Lamch, K. A. Wilk, P. Warszyński "Hydrophobically functionalized chitosan as a stabilizer for Pickering O/W emulsions", Book of Abstracts Poster Presentations 35th Conference of the European Colloids &Interface Society ECIS 2 2021, Ateny, Grecja, 5-10.09.2021, EP10.33 str. 316
3. C. Bertolin, M. Strojecki, L. de Ferri, G. Grottesi, A.M. Siani, "Salt contamination of wooden materials: the case of Trondheim (Norway) warehouses" in: "12th International Conference on Structural Analysis of Historical Constructions (SAHC 2021) ", (P. Roca, L. Pelà, C. Molins, Eds.), International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), Barcelona 2021, pp. 791–801 [ISSN 978-84-123222-0-0]
4. M. Borkowski, J. Zawała „Wpływ pola magnetycznego na mechanizm wyciekania pojedynczego filmu ciekłego oraz pian rzeczywistych stabilizowanych magneto-reaktywnymi surfaktantami", Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 22-26.08.2021 Lublin, (M. Kozioł, Ed.), Lublin 2021, str.17

5. M. Borkowski, J. Zawała, S. Benoit "Influence of a magnetic field on the drainage mechanism of the thin liquid film (TLF) and real foams stabilized by magneto-reactive surfactants", Book of Abstracts 34th M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 27-29.09.2021, online, (poster No. 8) str. 77
6. I. Brand, P. Komorek, B. Jachimska "Effect of the surface charge density of a gold electrode on the amount and conformation of adsorbing lysozyme", Abstract book XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Cluj-Napoca, Romania, 9-13.05.2021, The Bioelectrochemical Society, Lausanne, Switzerland 2021, S1-O13, str. 80, http://www.bes2021.org
7. E. Cichoń, J. Prajsnar, M. Guzik, J. Czechowska, S. Skibiński, P. Pańtak, A. Ślósarczyk, A. Zima "Foamed Calcium Phosphate Cements And Their Behaviour During Incubation In Distilled Water" Book of Abstracts. 30th Anniversary Conference "Biomaterials in Medicine and Veterinary Medicine", 14-17.10.2021 (E. Pamuła, P. Domalik-Pyzik, Eds.), Polish Society for Biomaterials in Krakow, Rytro 2021, str. 27 [ISSN 1429-7248]
8. A. Czakaj, M. Krzan, P. Warszyński, "Surface properties of arginine-based surfactant Ethyl Lauroyl Arginate", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S07 P027 str. 565 [ISBN 978-83-60988-32-9]
9. N. Diban, A. Pacula, I. Kumakiri, M. Mantecón, M. Romay, M.J. Rivero, A. Urtiga, I. Ortiz "Porous polymer membranes functionalized with active materials" Proceedings of the 6th International Symposium on "Green and Smart Technologies for a Sustainable Society" on-line 9-10.12.2021, Santander, Cantabria, Spain, str. 55
10. E. Dryzek, K. Skowron, M. Wróbel, L.L Joncour, M. François, B. Panicaud "Positron annihilation spectroscopy study of gradient microstructure in surface mechanical attrition treated titanium", Book of Abstracts 12.5th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 30 August – 3 September 2021 internet, str. 33
11. A. Drzewiecka-Matuszek, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, D. Rutkowska-Żbik "DFT and MD studies of hydrocarbon adsorption on zeolites", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str. 35 [ISBN 978-83-60514-34-4]
12. M. Duda, M. Grzesiak-Nowak, M. Oszajca, W. Łasocha "Synteza i badania strukturalne połączeń bromku kadmu z diaminami alifatycznymi z wykorzystaniem techniki rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej", Mater. 62 Konwersatorium Krystalograficzne 24-25.04.2021, on-line (M. Wołcyrz, D. Kowalska, Eds.) Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN, Wrocław, Komitet Krystalografii PAN, str. 38-39 [ISBN 978-83-939559-5-4]
13. M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, D. Duraczynska,A. Karabasz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz "The Role of Water in the Confinement of Ibuprofen in SBA-15", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p.35 [ISBN 978-83-60514-34-4]
14. D. Gaweł, J. Zawała „Wpływ warunków dynamicznych na stabilność filmów emulsyjnych w roztworach białek i klasycznych surfaktantów” Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 22-26.08.2021 Lublin, (M. Kozioł, Ed.), Lublin 2021, str. 19
15. M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner, M. Oszajca, K. Świderek, V. Moliner, A. J. Bojarski, M. Szaleniec "Dehydrogenazy 3-ketosteroidowe – modelowanie QMMM skonfrontowane

z pomiarami kinetycznego efektu izotopowego", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S10 KS03 str. 278 [ISBN 978-83-60988-32-9]

16. M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner, M. Oszajca, K. Świderek, V. Moliner, A. J. Bojarski, M. Szaleniec "QMMM and Kinetic Isotope Effect", Abstract Book of Advances and Challenges in Biomolecular Simulations, EMBO Workshop, 2021, str. 78

17. G. Gochev, B. Braunschweig, R. Campbell, E. Schneck, R. Miller "Effect of pH on the stability of protein foams" Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S08 KS02 str. 236 [ISBN 978-83-60988-32-9]

18. M. Guzik, A. Szeligowski, T. Witko, K. Haraźna, D. Solarz, K. Feliksiak, S. Skibiński, T. Majka, K. Pielichowski, M. Seta "Polyhydroxyalkanoate Biopolymers For Medical Applications" Book of Abstracts. 30th Anniversary Conference „Biomaterials in Medicine and Veterinary Medicine", 14-17.10.2021 (E. Pamuła, P. Domalik-Pyzik, Eds.), Polish Society for Biomaterials in Krakow, Rytro 2021, str. 29 [ISSN 1429-7248]

19. K. Haraźna, E. Cichoń, S. Skibiński, T. Witko, D. Solarz, E. Marcello, M. Zimowska, A. Zima, M. Witko, I. Roy, M. Guzik, "The differences in proliferation and cytotoxicity of MC3T3-E1 cell line on tricalcium phosphate composites containing physically and chemically bonded diclofenac to polyhydroxyoctanoate (PHO) polymer" - 45th FEBS Congress, Molecules of Life: Towards New Horizons, Ljubljana, Slovenia, 3–8.07.2021, FEBS Open Bio11(Suppl. 1) (2021) 103–507 Ljubljana, Slovenia 2021, P-06.4-22 str.239 DOI: 10.1002/2211-5463.13205

20. K. Haraźna, K. Stępień, A. Walczyk, M. Witko, M. Guzik, „Synteza oraz charakterystyka koniugatów oli(3HO)-gentamycyna", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S03 KS01 str. 143 [ISBN 978-83-60988-32-9]

21. K. Haraźna, A. Walczyk, M. Witko, M. Guzik „Charakterystyka 3-hydroksyalkanianowych nośników betametazonu" Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S03 P018 str. 474 [ISBN 978-83-60988-32-9]

22. K. Haraźna, A. Walczyk, E. Cichoń, M. Witko, B. Leszczyński, A. Wróbel, M. Guzik "Preparation of poly(3-hydroxyoctanoate) porous patches containing diclofenac modified oligomers as potential materials for biomedicine" Book of abstracts. 31st Conference of the European Society for Biomaterials together with the 43rd Annual Congress of the Iberian Society of Biomechanics and Biomaterials (SIBB), 5-9.09.2021 Porto, Portugalia 2021, str.1293

23. B. Jachimska, M. Szota, K. Rakowski "Corona Formation and Conformational Changes in Proteins on Dendrimers", Abstract book XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Cluj-Napoca, Romania, 9-13.05.2021, The Bioelectrochemical Society, Lausanne, Switzerland 2021, S1-O9, p. 76, http://www.bes2021.org

24. B. Jachimska, M. Szota, K. Rakowski "Structure and Function of Protein Corona on the Dendrimer Surface", Spring 2021 American Chemical Society National Meeting, USA 05-

16.04.2021(on-line) COLL, Section Biomaterials and Biointerfaces, ID 3554552, https://www.acs.org/content/acs/en/meetings/acs-meetings.html

25. R. Karcz, B.D. Napruszewska, A. Michalik, J. Kryściak-Czerwenka, D. Duraczyńska, E.M. Serwicka "Fine crystalline Mg-Al hydrotalcite-like compounds as catalysts for Baeyer-Villiger oxidation of cyclohexanone to ε-caprolactone" Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, p.13 [ISBN 978-83-60514-34-4]

26. R. Karcz, B.D. Napruszewska, A. Walczyk, J. Kryściak-Czerwenka, A. Michalik, E.M. Serwicka, "Baeyer-Villiger oxidation of cyclohexanone over Mg-Al hydrotalcite catalysts precipitated with different bases", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, p.39 [ISBN 978-83-60514-34-4]

27. T. Kastinen, P. Batys, M. Morga, J. L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "Effect of pH on complexation and secondary structures of polypeptides", Abstracts for the Oral Presentations "Computational Chemistry Days 2021", 15-16.12.2021, Aalto University,School of Chemical Engineering, str. 8

28. A.I. Klyndyuk, D.S. Kharitonov, M. Mosiałek, E.A. Chizhova, M. Zimowska, A. Komenda, R.P. Socha "Evaluation of layered oxygen-deficient $NdBa(Fe,Co,Cu)_2O_{5+\delta}$ double perovskites as cathode materials for solid oxide fuel cells", Book of Abstracts 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 6-9.06.2021 Kraków, Poland, (G. Mordarski, Ed.), IKIFP PAN, Kraków 2021, str.131 [ISBN 978-83-60514-33-7]

29. P. Komorek, E. Martin, M. Walek, B. Jachimska, "Adsorption behavior of lysozyme at solid/liquid interface studied by QCM-D, MP-SPR, and FTIR", Book of abstracts. ACS Spring Meeting 2021, online

30. P. Komorek, S. Świątek, G. Turner, B. Jachimska "β-lactoglobulin as a platform for designing biologically active carriers – experimental and computational studies", Book of abstracts 1st Symposium on Theranostics Saturday 09 October 2021 - Monday 11 October 2021 Theranostics Center / on-line, Kraków, Polska, 2021, str. 42-43

31. P. Komorek, E. Martin, B. Jachimska, "Behaviour of adsorbed proteins on gold surface", Book of abstracts. 1st Yale Postgraduate Trainee Research Symposium, August 19th 2021, New Haven, USA 2021, str. 12

32. T. Kruk, E. Jarek, Z. Krasińska-Krawet, Ł. Lamch, S. Ronka M. Szuwarzyński, K.A. Wilk, P. Warszyński,"Polymer films containing amphiphilic polyelectrolytes as novel materials for formation of pH responsive nanostructures", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S07 KS03 [ISBN 978-83-60988-32-9]

33. Z. Kurant, S.K. Jena, R. Gieniusz, U. Guzowska, M. Kisielewski, P. Mazalski, I. Sveklo, A. Wawro, A. Maziewski "Magnetic ordering in epitaxial ultrathin Co layers surrounded by Pt and W covers", Book of abstracts The European Conference Physics of Magnetism 2021 (PM'21), 28.06-02.07.2021 Poznań (Polska), (B. Idzikowski, R. Micnas, T. Toliński, M. Krawczyk, P. Leśniak, A. Szajek, Eds.), IFM PAN, Poznań 2021, O-5-26 str. 167 [ISBN 978-83-956445-2-8]

34. И.И. Курило, А.А.Касач, М.А. Осипенко, Д.С. Харитонов „Способ получения композиционных покрытий хитозан-TiO_2 на сплавах магния", Современные

Электрохимические Технологии и Оборудование, материалы международной научно-технической конференции (Moderm electrochemical technologies and equipment), Минск, 2021, str. 279–280. [ISBN: 978-985-530-921-6], https://elibrary.ru/item.asp?id=46488812.

35. Ł. Kuterasiński, P.J. Jodłowski, G. Kurowski, P. Jelen, M. Sitarz. "Sonochemical-assisted preparation of Co-Ce/γ-Al_2O_3 as catalysts for cyclohexene oxidation", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str.41 [ISBN 978-83-60514-34-4]

36. Ł. Kuterasiński, J. Podobiński, J. Datka. „IR spectroscopy studies of the Oxidation of Ethanol in Cu-Faujasites", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str.29 [ISBN 978-83-60514-34-4]

37. B. Lis, M. Dudek, A. Raźniak, T. Šalkus, A. Kežionis, S. Daugela, M. Mosiałek, "$Ba_{1-x}M_xCe_{0.9}Y_{0.1}O_{3-\delta}$ – based electrolytes for reversible protonic fuel cells", Book of Abstracts 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 6-9.06.2021 Kraków, Poland, (G. Mordarski, Ed.), IKIFP PAN, Kraków 2021, str.139 [ISBN 978-83-60514-33-7]

38. D. Lupa, Z. Adamczyk, P. Batys, W. Płaziński, M. Morga, A. Michna, "Macroion Conformation in Electrolyte Solution – Modelling, Experiment and Slender Body Hydrodynamics", Book of Abstracts 34th M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 27-29.09.2021, online, (poster No. 9) str. 78

39. D. Lupa, P. Batys, T. Kastinen, M. Sammalkorpi "Mechanizmy tworzenia i właściwości kompleksów liniowych polipeptydów", Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 22-26.08.2021 Lublin, (M. Kozioł, Ed.), Lublin 2021, str. 23

40. V. Lutsyk, W. Płaziński, "Conformational properties of glycosaminoglycan building blocks: molecular dynamics simulations" Book of abstracts X Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 3-5.09.2021, PTChM UMLub, Lublin 2021, PP13 str. 48.

41. E. Madej, M. Zając, J. Dedecek, K. Freindl, T. Giela, J. Korecki, M. Lemishka, K. Mlekodaj, J. Olszówka, D. Rutkowska-Żbik, M. Smoliło-Utrata, N. Spiridis, E. Tabor, D. Wilgocka-Ślęzak, "SOLARIS - pożyteczne narzędzie dla chemii", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S08 KS01 str. 235 [ISBN 978-83-60988-32-9]

42. I. Martynowicz, J. Adamowicz, M. Strojecki, M. Plotek "The altar by Veit Stoss in Krakow: Main issues involved in a complex conservation research project" in: Transcending Boundaries: Integrated Approaches to Conservation. ICOM-CC 19th Triennial Conference Preprints, Beijing, 17–21 May 2021, (J. Bridgland, Ed.) International Council of Museums, Paris 2021 [ISBN 978-2-491997-14-4]

43. P. Mazalski B. Anastaziak, P. Kuświk, I. Sveklo, A. Maziewski "Creation of submicrometer domains creation by temperature-induced changes of magnetic anisotropy in ultrathin Co/NiO bilayer", Book of abstracts The European Conference Physics of Magnetism 2021 (PM'21), 28.06-02.07.2021 Poznań (Polska), (B. Idzikowski, R. Micnas, T. Toliński, M. Krawczyk, P. Leśniak, A. Szajek, Eds.), IFM PAN, Poznań 2021, O-5-22 str. 163 [ISBN 978-83-956445-2-8]

44. M. Mączka, M. Mosiałek, P. Pasierb, "New cathode materials for Al-ion batteries", Book of Abstracts 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid

Interface (ISSIS), 6-9.06.2021 Kraków, Poland, (G. Mordarski, Ed.), IKIFP PAN, Kraków 2021, str.145 [ISBN 978-83-60514-33-7]

45. A. Micek-Ilnicka, M. Ruggiero-Mikołajczyk, K. Samson, M. Zimowska „Nanomateriały bazujące na TiO_2 do zastosowań katalitycznych", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S08 KS15 str. 249 [ISBN 978-83-60988-32-9]

46. A. Micek-Ilnicka, M. Ruggiero-Mikołajczyk, K. Samson, M. Zimowska, D. Rutkowska-Żbik, "Nanomateriały Cu-heteropolikwas-TiO_2 w roli fototermokatalizatorów", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p. 19 [ISBN 978-83-60514-34-4]

47. A. Michalik, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, E.M. Serwicka "Physicochemical characterization of montmorillonite composites with TiO_2 nanoparticles prepared by inverse microemulsion method", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p.34 [ISBN 978-83-60514-34-4]

48. A. Michna, A. Pomorska, J. Maciejewska-Prończuk, M. Wasilewska, T. Kilicer, Ö. Özcan "Wpływ warstwy kotwiczącej i rodzaju transportu na kinetykę adsorpcji lambda- karagenu", Książka abstraktów III Ogólnopolskiej Konferencji Naukowej „Biopolimery – źródło nowych materiałów", Fundacja na rzecz promocji nauki i rozwoju TYGIEL, Lublin 2021, str. 34 [ISBN 978-83-66861-26-8]

49. E. Młyńczak, L. Plucinski, C.M. Schneider "Electronic structure of Fe(001) with symmetry breaking due to the magnetization direction", Book of abstracts The European Conference Physics of Magnetism 2021 (PM'21), 28.06-02.07.2021 Poznań (Polska), (B. Idzikowski, R. Micnas, T. Toliński, M. Krawczyk, P. Leśniak, A. Szajek, Eds.), IFM PAN, Poznań 2021, O-3-209 str. 104 [ISBN 978-83-956445-2-8]

50. M. Nattich-Rak, Z. Adamczyk, "Tworzenie koron mioglobiny na powierzchniach mikrocząstek koloidalnych", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S03 P011 str. 467 [ISBN 978-83-60988-32-9]

51. M. Nattich-Rak, A. Pomorska, P. Batys, Z. Adamczyk, "Kinetyka adsorpcji mioglobiny na mice i sensorach krzemionce – rola oddziaływań elektrostatycznych", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S03 P010 str. 466 [ISBN 978-83-60988-32-9]

52. M.A. Osipenko, D.S. Kharitonov, A. Wrzesińska, A.A. Kasach, J. Adamiec, J. Ryl, I. Kurilo "The effect of sodium molybdate on corrosion of AZ31 magnesium alloy", 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 6-9.06.2021 Kraków, Poland, (G. Mordarski, Ed.), IKIFP PAN, Kraków 2021, str.131 [ISBN 978-83-60514-33-7]

53. G. Pacek, A. Alhaj Zein, K. Krämer, J. Heider, M. Szaleniec "Fumarate-adding enzymes: activity of the new BSS and NMS mutants", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str. 58 [ISBN 978-83-60514-34-4]

54. A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, K. Szczepanowicz "Materiały kompozytowe na bazie nanocząstek metalicznych do zastosowań w przemyśle elektroenergetycznym", Materiały

Konferencyjne „Fotowoltaika 2025” II Krajowa Konferencja Nauki i Przemysłu, 31.05 – 3.06.2021 Rytro, (K. Drabczyk, G. Kulesza-Matlak, Eds.), IMIM PAN, Kraków 2021, str. 47-50 [ISBN 978-83-60768-52-5]

55. A. Pajor-Świerzy, F. Szendera, R. Pawłowski, and K. Szczepanowicz "Nanocomposite inks based on metallic nanoparticles for fabrication of conductive coatings at low-temperature sintering" Book of Abstracts 2021, NanoTech Poland 2021 - 11th International Conference, Poznań, 9-11.06.2021 (S. Jurga, D. Flak, Eds.), NanoBioMedical Centre, UAM, str. 34

56. A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski,.G. Mordarski, K. Szczepanowicz "The effect of the size of Ni-Ag core-shell nanoparticles on the conductivity of ink coatings", Book of Abstracts Poster Presentations 35th conference of the European Colloid & Interface Society (ECIS 2021) 5-10.09.2021, Athens, Greece, 2021 EP1.36 str. 38

57. H. Pálková, M. Barlog, J. Madejová, E. Šimon, M. Zimowska "Structural changes in mechanochemically treated smectites investigated by infrared spectroscopy", Book of abstracts 8th Workshop of Slovak Clay Group. “Clay Minerals and Selected Industrial Minerals in Material Science, Applications and Environmental Technology”, 6-8.09.2021, Habovka, Slovakia (H. Pálková, T. Šimonová, Eds.), Slovak Clay Group, Bratislava 2021, str. 42-43 [ISBN 978-80-972367-5-5].

58. K. Pamin, J. Gurgul, L. Valentin, S. Dzwigaj "The effect of cobalt doping on properties of Co-containing siliceous BEA zeolite", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p.45, [ISBN 978-83-60514-34-4]

59. T. Panczyk, " “Telomeric DNA Fragments and Carbon Nanotubes as pH Controlled Carriers of Doxorubicin. Molecular Level Analysis", The 6th Ed. of the Smart Materials and Surfaces (SMS 2021), Book of Abstracts SMS 2021 / EGF 2021 / Sensors 2021 / NanoMed 2021 Joint Hybrid Conferences, 20-22.10.2021, Milan, Italy, www.setcor.org, str. 146

60. T. Pańczyk, P. Wolski, P. Wojtoń „Telomerowe motywy DNA jako aktywatory wiązania/uwalniania leków w nośnikach czułych na zmianę pH. Modelowanie z zastosowaniem dynamiki molekularnej”, Fizykochemia Granic Faz – Metody Instrumentalne, 22-26.08.2021 Lublin, (M. Kozioł, Ed.), Lublin 2021, str. 11

61. N. Piergies, A. Dazzi, A. Deniset-Besseau, J. Mathurin, M. Oćwieja, C. Paluszkiewicz, W.M. Kwiatek "A novel approach to characterize the drug-loaded nanoparticle systems based on nanospectroscopy" e-Book of Abstracts 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, 23-26 sierpnia 2021, konferencja on-line, str. 165

62. A. Płazińska, W. Płaziński "Chirality-related effects in biomolecular systems: methodologies for calculating the relative free energies by molecular dynamics simulations" Book of abstracts X Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 3-5.09.2021, PTChM UMLub, Lublin 2021, C4 str. 18

63. A. Pomorska, A. Michna, J. Maciejewska-Prończuk, M. Wasilewska, J. Witt, Ö. Özcan "Mechanizm formowania i stabilność warstw lambda karagenu na powierzchniach makroskopowych", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S08 KS03 str.237 [ISBN 978-83-60988-32-9]

64. K. Poznańska, A. Hola, N. Zabari, M. Strojecki, R. Kozłowski, Ł. Bratasz "Właściwości mechaniczne farb temperowych", XXI Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa, 2-3 grudnia 2021 r, str. 19

65. J. Prajsnar, J. Staroń, A. Bojarski, M Witko, M. Guzik "Polyhydroxyalkanoates - Production Strategies And Their Application In Medicine", Book of Abstracts. 30th Anniversary Conference „Biomaterials in Medicine and Veterinary Medicine", 14-17.10.2021 (E. Pamuła, P. Domalik-Pyzik, Eds.), Polish Society for Biomaterials in Krakow, Rytro 2021, str. 96 [ISSN 1429-7248]

66. M. Procner, G. Höff, J. Heider, M. Szaleniec "Exploration of unknown biochemical role of selenocysteine in enzymes", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p. 48, [ISBN 978-83-60514-34-4]

67. K. Rakowski, B. Jachimska "BSA as a biologically active nanocarriers – computational studies", Book of Abstracts 1st Symposium on Theranostics Saturday 09 October 2021 - Monday 11 October 2021 Theranostics Center / on-line, Kraków, Polska, 2021, str.28-29

68. F. Ravera, E. Santini, K. Dziza, L. Liggieri, E. Jarek, M. Krzan, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszynski, F.G. Huang, T. Fischer "Interfacial Properties, Emulsification and Emulsion Stability of Biocompatible Liquid-Liquid Systems", Book of Abstracts Oral Presentation 35th Conference of the European Colloids &Interface Society ECIS 2 2021, Ateny, Grecja, 5-10 September 2021, OP 10.7 str. 232

69. D. Rutkowska-Żbik, M. Smoliło, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Gurgul, A. Drzewiecka-Matuszek, L. Valentin, F. Averseng, Y. Millot, S. Dźwigaj „Wanad wprowadzony do krzemowej formy zeolitu BEA jako aktywny katalizator reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów: badania doświadczalne i teoretyczne", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S08 KS08 str. 242 [ISBN 978-83-60988-32-9]

70. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj „Struktura geometryczna i elektronowa układów TiO_2/Ag i TiO_2/HPW – obliczenia DFT", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S10 P005 str. 610 [ISBN 978-83-60988-32-9]

71. M. Sadowska, Z. Adamczyk, P. Żeliszewska "Applicability of quartz crystal microbalance technique for nano- and microparticle deposition kinetics: theoretical modeling and experiments", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S13 P005 str. 652 [ISBN 978-83-60988-32-9]

72. S. Seweryn, K. Skirlińska-Nosek, N. Wilkosz, J. Barbasz, M. Oćwieja, D. Perez-Guaita, K. Sofińska, M. Szymoński, E. Lipiec "Plasmonic hot spots enable spectroscopic exploration of the local conformational transitions induced by DNA double strand breaks", e-Book of Abstracts 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, 23-26 sierpnia 2021, konferencja on-line, str. 57

73. S. Skibiński, P. Pańtak, E. Cichoń, M. Guzik, J. Czechowska, A. Ślósarczyk, A. Zima "Biodegradable Tricalcium Phosphate/poly(3-hydroxybutyrate) Scaffolds For Bone Tissue Regeneration", Book of Abstracts. 30th Anniversary Conference „Biomaterials in Medicine and Veterinary Medicine", 14-17.10.2021 (E. Pamuła, P. Domalik-Pyzik, Eds.), Polish Society for Biomaterials in Krakow, Rytro 2021, str. 74 [ISSN 1429-7248]

74. K. Skirlińska-Nosek, S. Seweryn, N. Wilkosz, J. Barbasz, E. Lipiec, M. Oćwieja, D. Perez-Guaita, K. Sofińska, M. Szymoński "SERS and PLS - an ideal marriage?", e-Book of

Abstracts 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, 23-26 sierpnia 2021, konferencja on-line, str. 160

75. K. Skowron, E. Dryzek, M. Wróbel, P. Nowak, M. Marciszko-Wiąckowska, L.Le Joncour, M. François, B. Panicaud, A. Baczmański "Gradient microstructure induced by Surface Mechanical Attrition Treatment (SMAT) in magnesium studied by positron annihilation spectroscopy", Book of Abstracts YOUNG MULTIS 2021 “Multiscale Phenomena in Condensed Matter, Online conference for young researchers, Kraków 5-7.07.2021, IFJ PAN, Kraków 2021, str. 91.

76. K. Skowron, E. Dryzek, M. Wróbel , P. Nowak, M. Marciszko-Wiąckowska, L. Le Joncour, M. François, B. Panicaud, A. Baczmański "Positron annihilation spectroscopy study of gradient microstructure induced by Surface Mechanical Attrition Treatment (SMAT) in Mg", Book of Abstracts Book of Abstracts 12.5th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 30 August – 3 September 2021 internet, str. 34

77. A. Sławińska, K. Pamin, P. Serda, M. Oszajca, W. Łasocha "Nowe perokso- oraz poliokso-związki Mo(VI). Synteza, badania "strukturalne i zastosowania w procesach utleniania", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str. 52 [ISBN 978-83-60514-34-4]

78. M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Gackowski, G. Mordarski, M. Śliwa, J. Podobiński, J. Datka, D. Rutkowska-Żbik "Vanadium-Loaded Faujasites as Catalysts for the Oxidative Dehydrogenation of Propane", Abstracts. 6th International School-Conference on Catalysis for Young Scientists. Catalyst Design: From Molecular to Industrial Level. 16-19 May 2021, Novosibirsk Russia (V.I. Bukhtiyarov, O.N. Martyanov, Eds.), Boreskov Institute of Catalysis, Novosibirsk 2021, str. 112 [ISBN 978-5-906376-33-6]

79. M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Gackowski, D. Rutkowska-Żbik "Wpływ specjacji wanadu w katalizatorach na osnowie fojazytu w reakcji ODH lekkich alkanów" Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p.28, [ISBN 978-83-60514-34-4]

80. M. Szaleniec, A. Sekuła, A. Alhaj Zein, J. Heider "Radical C-C coupling catalyzed by glycyl radical enzyme, benzylsuccinate synthase from Thaurea aromatica", Book of Abstracts BIOTRANS Graz I 2021, 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Graz, Austria, Europe, Worldwide online, 19–22.06.2021, (V. Resch, Ed.) str. 287

81. M. Szaleniec, A. Sekuła, I. Salii, A. Alhaj Zein, D. Seyhan, J. Heider "Determinants for substrate recognition in benzylsuccinate synthase from Thauera aromatica - targeted mutagenesis and MD simulations", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p. 54 [ISBN 978-83-60514-34-4]

82. M. Szaleniec, A. Sekuła, I. Salii, A. Alhaj Zein, D. Seyhan, J. Heider "Determinants for substrate recognition in benzylsuccinate synthase from Thaurea aromatica - targeted mutagenesis and MD simulations", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S10 P001 str. 606 [ISBN 978-83-60988-32-9]

83. M. Szaleniec, A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider "A novel hydrogenase activity of tungsten aldehyde oxidoreductase from *Aromatoleum aromaticum*", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S06 KS01 str.201 [ISBN 978-83-60988-32-9]

84. K. Szczepanowicz, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarzc, M. Bzowska "Theranostic nanocarriers of anticancer drugs", Book of Abstracts 2021, NanoTech Poland 2021 - 11th International Conference, Poznań, 9-11.06.2021 (S. Jurga, D. Flak, Eds.), NanoBioMedical Centre, UAM, str.122

85. M. Szczęch, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Fluorine-based theranostic multilayer nanocarriers", Book of Abstracts Oral Presentation 35th Conference of the European Colloids &Interface Society ECIS 2 2021, Ateny, Grecja, 5-10 September 2021, OP5.10 str. 155

86. W. Szczęsna, M. Tsirigotis-Maniecka, Ł. Lamch, K. A. Wilk, E. Zboińska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "New antimicrobial hydrophobized poly(acrylic acids) as functional coatings for curcumin-loaded hydrogel microparticles", Book of Abstracts Poster Presentations 35th Conference of the European Colloids &Interface Society ECIS 2 2021, Ateny, Grecja, 5-10.09.2021, EP5.24 str. 185

87. M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska "Physicochemical characteristic of poly(amidoamine) dendrimers are their application in controlled drug delivery systems", Book of abstracts. 1st Symposium on Theranostics, Kraków, Polska, 2021, str. 25-26

88. M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska, „Poly(amidoamine) dendrimers as nanocarriers for anticancer drugs and their interactions with plasma proteins", Book of abstracts ,Interfaces 2021, International Conference of Interfaces, From new materials to life science – Structure, Interactions, Dynamics and Activity, 21-25.09.2021r., Santa Margherita di Pula, Sardinia, Italy, University of Cagliari O26 str. 54

89. M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska, "PAMAM dendrimers as effective 5-Fluorouracil delivery systems", Materiały konferencyjne II Sympozjum Biomateriały w Medycynie i Kosmetologii, 28.01.2021 Toruń, UMK Toruń, str.71

90. M. Szpytma, A. Koziol Rachwal, J. Korecki, M. Slezak, P. Drozdz, W. Janus, H. Nayyef, M. Zajac, T. Slezak, "Beating the limit of ordering temperature of FeO with antiferromagnetic proximity in FeO/CoO", IEEE International Magnetics INTERMAG 21 Virtual Conference, 26-30 April 2021, IG-07 str.1094

91. M. Śliwa, R. Socha, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B. Napruszewska "Copper based catalysts for ethanol steam reforming", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str. 42 [ISBN 978-83-60514-34-4]

92. M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovič " Effects of temperature, pH and additives on the activity of R-specific 1-(4-hydroxyphenyl)- ethanol dehydrogenase from Aromatoleum aromaticum", 47th International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering, SSCHE 2021 Online, Bratislava Slovakia 2021, str.18 [ISBN: 978-80-8208-057-8]

93. M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovič "Stability and inactivation of (R)-1-(4-hydroxyphenyl)- ethanol dehydrogenase from *A. aromaticum*", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S06 KS02 str. 202 [ISBN 978-83-60988-32-9]

94. M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovič "Thermal inactivation and aggregation of (R)-1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenase from *A. aromaticum*" Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str. 32 [ISBN 978-83-60514-34-4]

95. M. Tataruch, K. Zaczyk, P. Wójcik, A. M. Wojtkiewicz, K. Szymańska, M. Szaleniec, „Efektywność procesów reaktorowych z zastosowaniem immobilizowanej Δ1-dehydrogenazy-3-ketosteroidowej", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S06 P001 str. 522 [ISBN 978-83-60988-32-9]

96. J. Van Lindt, A. Bratek-Skicki, P. N. Nguyen, D. Pakravan, L. F. Durán-Armenta, A. Tantos, R. Pancsa, L. Van Den Bosch, D. Maes, P. Tompa, "A generic approach to study the kinetics of liquid–liquid phase separation under near-native conditions", Book of Abstracts I PhasAge International Conference, Phase Transitions in Aging and age-Related Diseases, virtual conference, 12-14.10.2021.

97. A. Walczyk, R. Karcz, A. Michalik, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, J. Kryściak-Czerwenka, E.M. Serwicka, P. Jeleń, M. Sitarz "Physicochemical characterisation of mechanochemically and alkali activated talc", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str.44 [ISBN 978-83-60514-34-4]

98. P. Warszyński, E. Jarek, Z. Krasińska-Krawet, T. Kruk, L. Lamch, S. Ronka, K.A. Wilk, "Effect of the Linker on Adsorption Properties of Soft Hydrophobically Functionalized PSS/MA Polyelectrolytes", Book of Abstracts Oral Presentation 35th Conference of the European Colloids &Interface Society ECIS 2 2021, Ateny, Grecja, 5-10 September 2021, OP9.12, p.212

99. P. Weroński "Roughness spectroscopy of particle monolayer", Book of Abstracts 34th M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 27-29.09.2021, online, (poster No. 13) str. 82.

100. A. Winiarska, Y. Gemmecker, D. Hege, J. Heider, M. Szaleniec, " "Hydrogen-driven benzyl alcohol production by oxidoreductases from Aromatoleum aromaticum", Book of Abstracts BIOTRANS Graz I 2021, 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Graz, Austria, Europe, Worldwide online, 19–22.06.2021, (V. Resch, Ed.) str. 221

101. A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider, M. Szaleniec, "A new type of hydrogenase - tungsten aldehyde oxidoreductase from Aromatoleum aromaticum", Abstract book MoTeC-12th Molybdenum and Tungsten Enzymes Conference, 27.09.-01.10.2021, Marsylia, Francja, str. 26

102. A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider, M. Szaleniec, "Tungsten Aldehyde Oxidoreductase – a new type of hydrogenase", Book of Abstracts BIOTRANS Graz I 2021, 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Graz, Austria, Europe, Worldwide online, 19–22.06.2021, (V. Resch, Ed.) str. 50

103. A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, A. Seubert, J. Schuller, J. Heider, M. Szaleniec " "A tungsten enzyme is a hydrogenase, reducing carboxylic acid with electron bifurcation", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A.Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, p.21, [ISBN 978-83-60514-34-4]

104. A. Winiarska, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider, M. Szaleniec "Reduction of carboxylic acid catalysed by W-dependent aldehyde oxidoreductase from Aromatoleum aromaticum", Książka Abstraktów, 9. Międzyuczelniane Sympozjum Biotechnologiczne „Symbioza" 21–23.05.2021 (The 9th Intercollegiate Biotechnology Symposium "Symbioza". Book of abstracts) (K.W. Szewczyk, Ed.), Warszawskie Stowarzyszenie Biotechnologiczne „Symbioza", Warszawa 2021, Polska, str.67 [ISBN 978-83-954288-2-1]

105. P. Wojtoń, T. Pańczyk, P. Wolski, "Interakcje nanorurek węglowych z telomerycznym DNA zawierającym niekanoniczne formy G-quadruplex i i-motif", Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 22-26.08.2021 Lublin, (M. Kozioł, Ed.), Lublin 2021, str. 134

106. P. Wójcik, B. Mrugała, M. Glanowski, M. Procner, K. Kurpiewska, O. Zastawny, M. Guzik, M. Oszajca, M. Szaleniec, "Δ1-Dehydrogenation of 3-ketosteroids by 3-ketosteroid dehydrogenase from Sterolibacterium denitrificans – structural and mechanistic studies", Book of Abstracts BIOTRANS Graz I 2021, 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Graz, Austria, Europe, Worldwide online, 19–22.06.2021, (V. Resch, Ed.) str. 356

107. M. Zimowska, J. Gurgul, H. Pálková, L. Lityńska-Dobrzyńska, K. Łątka, "Surface imaging of sonochemically and hydrothermally prepared Fe doped porous clay derived heterostructures", Book of Abstracts 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 6-9.06.2021 Kraków, Poland, (G. Mordarski, Ed.), IKIFP PAN, Kraków 2021, str.177 [ISBN 978-83-60514-33-7]

108. M. Zimowska, H. Pálková, M. Śliwa, J. Gurgul, "Sorption properties of Laponite-derived nanocomposites triggered by chemical and hydrothermal treatment", Mater. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str.43 [ISBN 978-83-60514-34-4]

109. M. Zimowska, M. Śliwa, R. P. Socha, H. Pálková, "Surface segregation of the Mg species as a result of chemical and hydrothermal treatment of the Laponite-based nanocomposites", Book of abstracts 8th Workshop of Slovak Clay Group. "Clay Minerals and Selected Industrial Minerals in Material Science, Applications and Environmental Technology", 6-8.09.2021, Habovka, Slovakia (H. Pálková, T. Šimonová, Eds.), Slovak Clay Group, Bratislava 2021, pp. 48-49 [ISBN 978-80-972367-5-5]

110. P. Żeliszewska, M. Sadowska, M. Morga, Z. Adamczyk, "Deposition efficiency of particles with fibrinogen corona on solid substrate", Mater. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź, 13-17 września 2021 (T. Cierpiał, P. Tokarz, S. Rykowski, Eds.), Polskie Towarzystwo Chemiczne, Warszawa 2021, S07 KS01 str. 222 [ISBN 978-83-60988-32-9]

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LIII Polish Annual Conference on Catalysis, 22-24.09.2021 Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2021, str. 1-75, [ISBN 978-83-60514-34-4]

2. 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 6-9.06.2021 Kraków, Poland, Book of Abstracts, (G. Mordarski, Ed.), IKIFP PAN, Kraków 2021, str. 1-190, [ISBN 978-83-60514-33-7]

EDYTORSTWO MONOGRAFII

1. “Innovation & Impact 2020” Special Issue 2: “The Australia Innovation Ecosystem”, (G. Liśkiewicz, B. Jachimska, K. Zapadka Eds.), ISSN (Online) 2450-4408
2. Special Issue "Functionalized Gold Nanoparticles: Synthesis, Properties and Biomedical Applications" w "Nanomaterials" (M. Oćwieja *Guest Ed*.) Wydawca MDPI, ISSN 2079-4991
3. Special Issue "Functional Polymeric Nanoparticles" w "Nanomaterials" (K. Szczepanowicz *Guest Ed*.) Wydawca MDPI, ISSN 2079-4991
4. Special Issue "Heterogeneous Interfacial Layers – Implications in Thin Liquid Films and Soft Colloids (Dedicated to the 65th Anniversary of Prof. Elena Mileva)" w "Colloids and Interfaces" (G. Gochev *Guest Ed*.) Wydawca MDPI, ISSN 2504-5377
5. Special issue "Application of Nanocomposites in the Environment" w "International Journal of Environmental Research and Public Health" (A. Michna, M. Morga, D. Kosior *Guest Eds*.) Wydawca MDPI, ISSN 1660-4601
6. Special Issue "Mechanisms and Kinetics of Interactions of Biomolecules at Interfaces" w "Biomolecules"(M. Wasilewska, A. Michna, M. Morga, A.G. Cherstvy *Guest Eds.*) Wydawca MDPI, ISSN 2218-273X
7. Special Issue "Metal and Metal Oxide Nanoparticles-Based Materials for Medical and Catalytic Applications" w "Materials" (M. Oćwieja, A. Węgrzynowicz *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, EISSN 1996-1944
8. "Special Issue in Honor of the 70th Birthday of Professor Zbigniew Adamczyk" w "Advances in Colloid and Interface Science" (A. Szcześ, P. Warszyński, M. Oćwieja, M. Nattich-Rak, R. Miller *Guest Eds.*), Wydawca Elsevier B.V., ISSN 0001-8686
9. Special Issue "Applications of Microbial Enzymes in Organic Synthesis" w "Molecules"(M. Szaleniec *Guest Ed*.), Wydawca MDPI, EISSN 1420-3049
10. Special Issue "Smart Polymeric Materials: New Developments and Perspectives for Future Applications" w "Applied Surface Science Advances" (A. Bratek-Skicki, K. Szczepanowicz *Guest Eds.*), Wydawca Elsevier B.V., ISSN: 2666-5239
11. Special Issue "Biomedical Applications of Carbon Nanostructures" w "International Journal of Molecular Sciences" (T. Pańczyk *Guest Ed.*), Wydawca MDPI, ISSN 1422-0067
12. Special Issue "The Frontier of Self-Assembled Polymers and Dendronized Polymers-Based Smart Materials" w "Polymers" (M. Gosecka, M. Wasilewska *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 2073-4360
13. Special Issue "Electrocrystallization of Metallic Alloys and Composites" w "Crystals" (D. Kharitonov, R. Socha, J. Ryl, I. Kurilo *Guest Eds*.) Wydawca MDPI, ISSN 2073-4352

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

UZYSKANE PATENTY

1. K. Pamin, J. Połtowicz, S. Dźwigaj, „Sposób utleniania cykloheksanonu do ε-kaprolaktonu”, Polish Patent, PL 238284 B1 (23.04.2021, 02.08.2021 w W.U.P.)
2. Z. Adamczyk, M. Morga, D. Kosior „Sposób wyznaczania masy molowej polielektrolitów liniowych, zwłaszcza polilizyny”, Polish Patent, PL 236792 (23.10.2020, 22.02.2021 w W.U.P.)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

1 M. Guzik, W. Snoch, D. Wnuk, J. Staroń, „Zastosowanie estrów cukrowych kwasów tłuszczowych o komponencie kwasowej będącej mieszaniną monomerów uzyskanych z bakteryjnego polihydroksynonaniano - co - heptanianu do hamowania proliferacji komórek nowotworowych w leczeniu i profilaktyce chorób”, Zgłoszenie patentowe RP, P.437233 (2021)

2 A. Winiarska, J. Heider, M. Szaleniec, D. Hege, F. Arndt, „Sposób otrzymywania aldehydów poprzez enzymatyczną redukcję kwasów karboksylowych”, Zgłoszenie patentowe RP, P.437445 (2021)

3 A. Winiarska, J. Heider, M. Szaleniec, D. Hege, F. Arndt, „Sposób enzymatycznej redukcji formy utlenionej dinukleotydu nikotynowo-adeninowego”, Zgłoszenie patentowe RP, P.437449 (2021)

4 A. Wojtkiewicz, M. Szaleniec, M. Guzik, J. Prajsnar, „Sposób enzymatycznej syntezy glochidonu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.439727 (2021)

5 M. Guzik, M. Mosiałek, P. Pasierb, M. Mączka, „Ogniwo glinowo - jonowe do magazynowania energii elektrycznej”, Zgłoszenie patentowe RP, P.439841 (2021)

Zgłoszenia patentowe publikowane w W.U.P.

1. T. Majka, E. Hebda, K. Pielichowski, M. Guzik „Sposób krystalizacji polihydroksyoktanianu z roztworu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.434423
2. P. Wójcik, A.M. Wojtkiewicz, M. Tataruch, J. Morzycki, M. Szaleniec „Sposób wytwarzania (25R)-spirosta-1,4-dien-3-onu z diosgenonu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.433249

UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH 2021

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1 S. Antropov, N. Zabari, L. Bratasz, "Właściwości mechaniczne farb temperowych", Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2021

2 Ł. Bratasz, "Crack patterns in panel paintings: modelling and experimental verification", Mechanics for Art Conservation Workshop, London 2021

3 Ł. Bratasz "Ilościowa analiza ryzyka w obszarze dziedzictwa kulturowego", Międzynarodowa Konferencja Naukowa" Ochrona Dziedzictwa Kultury na wypadek szczególnych zagrożeń – zagrożenia klimatyczne, pandemiczne i pożarowe. Dobre praktyki", Kraków 2021

4 Ł. Bratasz, "Heritege science – an emerging discipline", International Conference Museums Fit for the 21th Century. The Challenge of Technology, Europejskie Centrum Solidarności, Gdańsk 2021

5 Ł. Bratasz, M. Soboń "Preservation of wooden heritage objects: needs and gaps in knowledge", VirtEx - Virtual Experiments for Wooden Artwork - International Online-Colloquium, , Dresden 2021

6 A. Bratek-Skicki "Mixed polymer brushes for reversible adsorption and desorption of proteins", "Polymer Brushes", Dresden 2021

7 B. Jachimska, J. Rea, M. Szota, K. Rakowski "Protein corona formation: impact on nanoparticles bio-behavior", 10th International Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing – SMCBS'2021, 2021

8 J. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, P. Batys "Temperature, water, and ion-pairing effects in polyelectrolyte complexes and multilayers", APS March Meeting 2021, Chicago 2021

9 M. Oćwieja "Trendy w badaniach bioaktywności nanocząstek srebra" 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

10 T. Pańczyk, P. Wolski, P. Wojtoń „Telomerowe motywy DNA jako aktywatory wiązania/uwalniania leków w nośnikach czułych na zmianę pH. Modelowanie z zastosowaniem dynamiki molekularnej”, Fizykochemia Granic Faz – Metody Instrumentalne, Lublin 2021.

11 K. Poznańska, A. Hola, N. Zabari, M. Strojecki, R. Kozłowski, L. Bratasz „Zastosowanie skanera mikroskopowego do analizy siatki spękań”, Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2021

12 M. Soboń, Ł. Bratasz "Preservation of wooden heritage objects – gaps in knowledge impairing development of optimal environmental specifications", Workshop Virtual Experiments for Wooden Artwork – VirtEx, Drezno 2021

13 M. Strojecki "Airborne particles in historic churches – sources, deposition and soiling", The 3rd International Conference on Advances in Civil and Ecological Engineering Research (ACEER 2021), Bejing 2021

14 M. Strojecki "HERIe - decision-supporting platform in the service of heritage science", Imaging Cultural Heritage: technologies, methods, models and risk assessment workshop (on-line), Sønderborg 2021

15 M. Strojecki "HERIe - digital decision-supporting platform in the service of cultural heritage research", MCI seminar, (on-line), 7.04.2021, Sønderborg 2021

16 M. Szczęch and K. Szczepanowicz "Polymeric core-shell nanoparticles – preparation, characterization and biomedical application", 9th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2021, Lviv 2021

17 J. Zawała "Influence of interfacial mobility on bubble motion, collision kinetics and stability of liquid films at interfaces - experiment and modeling", CHISA Virtually, Prague 2021

REFERATY I KOMUNIKATY

1 C. Bertolin, M. Strojecki, L. de Ferri, G. Grottesi, A.M. Siani, "Salt contamination of wooden materials: the case of Trondheim (Norway) warehouses", 12th International Conference on Structural Analysis of Historical Constructions (SAHC 2021), Barcelona 2021

2 C. Bertolin et al., "The Symbol – Sustainable Management of Heritage Building in a Long-term perspective Project", SyMBoL - Sustainable Management of heritage Buildings in a Long-Term prospective - Final conference (on-line), Trondheim 2021

3 M. Borkowski, J. Zawała „Wpływ pola magnetycznego na mechanizm wyciekania pojedynczego filmu ciekłego oraz pian rzeczywistych stabilizowanych magneto-reaktywnymi surfaktantami" , Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, Lublin 2021

4 I. Brand, P. Komorek, B. Jachimska "Effect of the surface charge density of a gold electrode on the amount and conformation of adsorbing lysozyme", XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society 2021, Bioelectrochemical Society, Cluj-Napoca 2021

5 Ł. Bratasz, M. Soboń, M. Strojecki, Ł. Berger, C. Bertolin, R. Kozłowski "HERIE tool to support preservation of stave churches", SyMBoL - Sustainable Management of heritage Buildings in a Long-Term prospective - Final conference (on-line), Trondheim 2021

6 Ł. Bratasz, M. Soboń, M. Strojecki, Ł. Berger, R. Kozłowski "HERIe as as a decision supporting tool", COLLECTION CARE: New Challenges in Preventive Conservation, Predictive Analysis and Environmental Monitoring, (on-line), Valencia 2021

7 N. Diban, A. Pacula, I. Kumakiri, M. Mantecón, M. Romay, M.J. Rivero, A. Urtiga, I. Ortiz "Porous polymer membranes functionalized with active materials" 6th International Symposium on Green and Smart Technologies for a Sustainable Society" on-line 9-10/12/2021

8 E. Dryzek, K. Skowron, M. Wróbel, L.L Joncour, M. François, B. Panicaud "Positron annihilation spectroscopy study of gradient microstructure in surface mechanical attrition treated titanium", 12.5th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, on-line 2021

9 A. Drzewiecka-Matuszek, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, D. Rutkowska-Żbik "DFT and MD studies of hydrocarbon adsorption on zeolites", 53 Polish Annual Conference on Catalysis, Kraków 2021

10 M. Duda, M. Grzesiak-Nowak, M. Oszajca, W. Łasocha "Synteza i badania strukturalne połączeń bromku kadmu z diaminami alifatycznymi z wykorzystaniem techniki rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej ", 62 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2021

11 M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, D. Duraczynska, A. Karabasz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz "The Role of Water in the Confinement of Ibuprofen in SBA-15", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

12 D. Gaweł, J. Zawała „Wpływ warunków dynamicznych na stabilność filmów emulsyjnych w roztworach białek i klasycznych surfaktantów”, Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, Lublin 2021

13 M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner, M. Oszajca, K. Świderek, V. Moliner, A. J. Bojarski, M. Szaleniec "Dehydrogenazy 3-ketosteroidowe – modelowanie QMMM skonfrontowane z pomiarami kinetycznego efektu izotopowego", 63. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Warszawa 2021

14 M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner, M. Oszajca, K. Świderek, V. Moliner, A. J. Bojarski, M. Szaleniec "Insight into enzymatic Δ1-dehydrogenation of 3-ketosteroids: over 50 years of research verified with QM/MM", 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, on-line 2021

15 G. Gochev, B. Braunschweig, R. Campbell, E. Schneck, R. Miller "Effect of pH on the stability of protein foams", 63. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, (on-line) Łódź 2021

16 M. Guzik, A. Szeligowski, T. Witko, K. Haraźna, D. Solarz, K. Feliksiak, S. Skibiński, T. Majka, K. Pielichowski, M. Seta "Polyhydroxyalkanoate Biopolymers For Medical Applications", 30th conference "Biomaterials in medicine and veterinary medicine", Rytro 2021

17 K. Harazna, E. Cichon, S. Skibinski, T. Witko, D. Solarz, E. Marcello, M. Zimowska, A. Zima, M. Witko, I. Roy, M. Guzik "The differences in proliferation and cytotoxicity of MC3T3-E1 cell line on tricalcium phosphate composites containing physically and chemically bonded diclofenac to polyhydroxyoctanoate (PHO) polymer" - FEBS OPEN BIO 2021

18 K. Haraźna, K. Stępień, A. Walczyk, M. Witko, M. Guzik "Synteza oraz charakterystyka koniugatów oli(3HO)-gentamycyna", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

19 B. Jachimska, M. Szota, K. Rakowski "Corona Formation and Conformational Changes in Proteins on Dendrimers", XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society 2021

20 B. Jachimska, M. Szota, K. Rakowski "Structure and Function of Protein Corona on the Dendrimer Surface", Spring 2021 American Chemical Society National Meeting, (on-line) USA 2021

21 M.Y.A. Jamalabadi, N. Zabari, Ł. Bratasz "Numerical and Experimental Investigation of Fracture Mechanism in Paintings on Wood", International Conference on Museums Heritage Conservation, Paryż 2021

22 R. Karcz, B.D. Napruszewska, A. Michalik, J. Kryściak-Czerwenka, D. Duraczyńska, E.M. Serwicka "Fine crystalline Mg-Al hydrotalcite-like compounds as catalysts for Baeyer-Villiger oxidation of cyclohexanone to ε-caprolactone", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

23 R. Karcz, B. D. Napruszewska, A. Walczyk, J. Kryściak-Czerwenka, A. Michalik, E.M. Serwicka, "Baeyer-Villiger oxidation of cyclohexanone over Mg-Al hydrotalcite catalysts precipitated with different bases", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

24 T. Kastinen, P. Batys, M. Morga, J. L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi "Effect of pH on complexation and secondary structures of polypeptides", Computational Chemistry Days 2021, (on-line)

25 P. Komorek, E. Martin, M. Walek, B. Jachimska "Adsorption behavior of lysozyme at solid/liquid interface studied by QCM-D, MP-SPR, and FTIR", ACS Spring 2021, on-line, 2021

26 P. Komorek, E. Martin, B. Jachimska, "Behaviour of adsorbed proteins on gold surface", 1st Yale Postgraduate Trainee Research Symposium, New Haven 2021

27 T. Kruk, E. Jarek, Z. Krasińska-Krawet, Ł. Lamch, S. Ronka, M. Szuwarzyński, K.A. Wilk, P. Warszyński "Polymer films containing amphiphilic polyelectrolytes as novel materials for formation of pH responsive nanostructures", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

28 T. Kruk, P. Warszyński "Conductive nanofilms with charged reduced graphene oxides as a base for electroactive coatings and sensors", Graphene Week 2021, (on-line), hosted by Universite de Strasbourg 2021

29 Z. Kurant, S.K. Jena, R. Gieniusz, U. Guzowska, M. Kisielewski, P. Mazalski, I. Sveklo, A. Wawro, A. Maziewski "Magnetic ordering in epitaxial ultrathin Co layers surrounded by Pt and W covers", The European Conference Physics of Magnetism 2021 (PM'21), Poznań 2021

30 Ł. Kuterasiński, P.J. Jodłowski, G. Kurowski, P. Jelen, M. Sitarz "Sonochemical-assisted preparation of Co-Ce/γ-Al_2O_3 as catalysts for cyclohexene oxidation", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

31 Ł. Kuterasiński, J. Podobiński, J. Datka "IR spectroscopy studies of the Oxidation of Ethanol in Cu-Faujasites", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

32 D. Lupa, P. Batys, T. Kastinen, M. Sammalkorpi "Mechanizmy tworzenia i właściwości kompleksów liniowych polipeptydów", Fizykochemia Granic Faz, Lublin 2021

33 V. Lutsyk, W. Płaziński "Conformational properties of glycosaminoglycan building blocks: molecular dynamics simulations", X Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 2021

34 M. Łukomski, N. Fujisawa, A. BridarollI, Ł. Bratasz, A. Janas, R. Kozlowski, L. Fuster López, C. Krarup Andersen, M. Scharff "Mechanical properties of historic oil paints etablished by combination of macro-, micro- and nano - techniques" CollectionCare conference - New chalanges in preventive conservation, Predictive Analysis and Environemntal Monitoring, Valencia 2021

35 E. Madej, M. Zając, J. Dedecek, K. Freindl, T. Giela, J.Korecki, M. Lemishka, K. Mlekodaj, J. Olszówka, D. Rutkowska-Żbik, M. Smoliło-Utrata, N. Spiridis, E. Tabor, D. Wilgocka-Ślęzak "SOLARIS - pożyteczne narzędzie dla chemii", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, (on-line) Łódź 2021

36 I. Martynowicz, J. Adamowicz, M. Strojecki, M. Plotek "The altar by Veit Stoss in Krakow: Main issues involved in a complex conservation research project". In Transcending Boundaries: Integrated Approaches to Conservation. ICOM-CC 19th Triennial Conference Preprints, Beijing 2021

37 P. Mazalski et al., "Submicrometer domains creation by temperature-induced changes of magnetic anisotropy in ultrathin Co/NiO bilayer", Physics of Magnetism 2021 (PM'21), Poznań 2021

38 P. Mazalski, R. Gieniusz, I. Sveclo, M. Kowacz, B. Anastaziak, P. Kuświk, U. Guzowska, A. Maziewski "Strong interfacial Dzyaloshinskii-Moriya interaction and magnetic anisotropy in NiO/Co/Pt trilayers", Trends in MAGnetism 2021, Cefelu 2021

39 A. Micek-Ilnicka, M. Ruggiero-Mikołajczyk, K. Samson, M. Zimowska „Nanomateriały bazujące na TiO_2 do zastosowań katalitycznych", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego; Łódź 2021

40 A. Micek-Ilnicka, M. Ruggiero-Mikołajczyk, K. Samson, M. Zimowska, D. Rutkowska-Żbik, "Nanomateriały Cu-heteropolikwas-TiO_2 w roli fototermokatalizatorów", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

41 A. Michalik, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, E.M. Serwicka "Physicochemical characterization of montmorillonite composites with TiO_2 nanoparticles prepared by inverse microemulsion method", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

42 A. Michna, A. Pomorska, J. Maciejewska-Prończuk, M. Wasilewska, T. Kilicer, Ö. Özcan "Wpływ warstwy kotwiczącej i rodzaju transportu na kinetykę adsorpcji lambda- karagenu", III Ogólnopolskiej Konferencji Naukowej „Biopolimery – źródło nowych materiałów", Lublin 2021

43 E. Młyńczak, L. Plucinski, C.M. Schneider "Electronic structure of Fe(001) with symmetry breaking due to the magnetization direction", The European Conference Physics of Magnetism, Poznań 2021

44 G. Pacek, A. Alhaj Zein, K. Krämer, J. Heider, M. Szaleniec "Fumarate-adding enzymes: activity of the new BSS and NMS mutants", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

45 A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, K. Szczepanowicz "Materiały kompozytowe na bazie nanocząstek metalicznych do zastosowań w przemyśle elektroenergetycznym", „Fotowoltaika 2025" II Krajowa Konferencja Nauki i Przemysłu, Rytro 2021

46 A. Pajor-Świerzy, F. Szendera, R. Pawłowski, K. Szczepanowicz "Application of nanocomposite metallic ink for fabrication of conductive coatings at low-temperature sintering" 9th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2021, Lwów 2021

47 A. Pajor-Świerzy, F. Szendera, R. Pawłowski, and K. Szczepanowicz "Nanocomposite inks based on metallic nanoparticles for fabrication of conductive coatings at low-temperature sintering" 11th International Conference NanoTech, Poznań 2021

48 K. Pamin, J. Gurgul, L. Valentin, S. Dzwigaj "The effect of cobalt doping on properties of Co-containing siliceous BEA zeolite", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 2021

49 T. Panczyk "Telomeric DNA Fragments and Carbon Nanotubes as pH Controlled Carriers of Doxorubicin. Molecular Level Analysis", The 6th Ed. of the Smart Materials and Surfaces - SMS 2021 Conference, Milan 2021

50 T. Panczyk, P. Wolski, P. Wojton "Carbon nanotubes and telomeric DNA fragments as novel materials for drug delivery technology. Insights from molecular simulations", 23th International Conference MATERIALS, METHODS & TECHNOLOGIES, Burgas 2021

51 T. Panczyk, P. Wolski, P. Wojton "Interaction of Human Telomeric i-motif DNA with Single Walled Carbon Nanotubes. Insights from Molecular Dynamics Simulations", Chemistry World 2021 Webinar, Rome 2021

52 N. Piergies, A. Dazzi, A. Deniset-Besseau, J. Mathurin, M. Oćwieja, C. Paluszkiewicz, W.M. Kwiatek "A novel approach to characterize the drug-loaded nanoparticle systems based on nanospectroscopy", 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, (on-line) 2021

53 A. Płazińska, W. Płaziński, "Chirality-related effects in biomolecular systems: methodologies for calculating the relative free energies by molecular dynamics simulations", X Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 2021

54 A. Pomorska, A. Michna, J. Maciejewska-Prończuk, M. Wasilewska, J. Witt, Ö. Özcan "Mechanizm formowania i stabilność warstw lambda karagenu na powierzchniach makroskopowych", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego (online) 2021

55 K. Poznańska, A. Hola, N. Zabari, M. Strojecki, R. Kozłowski, Ł. Bratasz "Mechanical properties of tempera Paints", CollectionCare conference - New chalanges in preventive conservation, Predictive Analysis and Environemntal Monitoring, Valencia 2021

56 K. Poznańska, A. Hola, N. Zabari, M. Strojecki, R. Kozłowski, Ł. Bratasz "Właściwości mechaniczne farb temperowych", Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2021

57 M. Procner, G. Höff, J. Heider, M. Szaleniec "Exploration of unknown biochemical role of selenocysteine in enzymes", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

58 F. Ravera, E. Santini, K. Dziza, L. Liggieri, E. Jarek, M. Krzan, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszynski, F.G. Huang, T. Fischer "Interfacial Properties, Emulsification and Emulsion Stability of Biocompatible Liquid-Liquid Systems", 35th Conference of the European Colloids &Interface Society ECIS 2021, Ateny 2021

59 D. Rutkowska-Żbik, M. Smoliło, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Gurgul, A. Drzewiecka-Matuszek, L. Valentin, F. Averseng, Y. Millot, S. Dźwigaj „Wanad wprowadzony do krzemowej formy zeolitu BEA jako aktywny katalizator reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów: badania doświadczalne i teoretyczne”, 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

60 D. Sang-Hoon Lee, N. Kim, M. Scharff, A. Valbjørn Nielsen, M. Mecklenburg, L. Fuster-Lopez, L. Bratasz, C. Krarup Andersen "Numerical modelling of mechanical degradation of canvas paintings under dissication" CollectionCare conference - New chalanges in preventive conservation, Predictive Analysis and Environemntal Monitoring, Valencia 2021

61 S. Seweryn, K. Skirlińska-Nosek, N. Wilkosz, J. Barbasz, M. Oćwieja, D. Perez-Guaita, K. Sofińska, M. Szymoński, E. Lipiec "Plasmonic hot spots enable spectroscopic exploration of the local conformational transitions induced by DNA double strand breaks" 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, (on-line) 2021

62 K. Skirlińska-Nosek, S. Seweryn, N. Wilkosz, J. Barbasz, E. Lipiec, M. Oćwieja, D. Perez-Guaita, K. Sofińska, M. Szymoński "SERS and PLS - an ideal marriage?"e-Book of Abstracts 11th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, (on-line) 2021

63 K. Skowron, E. Dryzek, M. Wróbel, P. Nowak, M. MarciszkoWiąckowska, L.L. Joncour, M. François, B. Panicaud, A. Baczmański "Gradient microstructure induced by Surface Mechanical Attrition Treatment (SMAT) in magnesium studied by positron annihilation spectroscopy", YOUNG MULTIS - Multiscale Phenomena in Condensed Matter - conference for young researchers, (on-line) Kraków 2021

64 K. Skowron, E. Dryzek, M. Wróbel , P. Nowak, M. Marciszko-Wiąckowska, L. Le Joncour, M. François, B. Panicaud, A. Baczmański "Positron annihilation spectroscopy study of gradient microstructure induced by Surface Mechanical Attrition Treatment (SMAT) in Mg", 12.5th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry, (on-line) 2021

65 A. Sławińska, K. Pamin, P. Serda, M. Oszajca, W. Łasocha "Nowe perokso- oraz polioksozwiązki Mo(VI). Synteza, badania "strukturalne i zastosowania w procesach utleniania", 53. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

66 M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Gackowski, G. Mordarski, M. Śliwa, J. Podobiński, J. Datka, D. Rutkowska-Żbik "Vanadium-Loaded Faujasites as Catalysts for the Oxidative Dehydrogenation of Propane" 6th International School-Conference on Catalysis for Young Scientists. Catalyst Design: From Molecular to Industrial Level, Novosibirsk 2021

67 M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, D. Rutkowska-Żbik "Vanadium-loaded zeolites as catalysts for the oxidative dehydrogenation of propane", School on Catalysis, Liblice Castle 2021

68 M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Gackowski, D. Rutkowska-Żbik „Wpływ specjacji wanadu w katalizatorach na osnowie fojazytu w reakcji ODH lekkich alkanów”, LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

69 M. Soboń, Ł. Bratasz, M. Strojecki "Effect of relative humidity variations on massive wooden objects in stave churches based on numerical modeling", SyMBoL - Sustainable Management of heritage Buildings in a Long-Term prospective - Final conference (on-line), Trondheim 2021

70 M. Soboń, Ł. Bratasz, M. Strojecki "Modelling the risk of fracture in massive sculptures due to environmental stresses", Imaging Cultural Heritage: technologies, methods, models and risk assessment workshop, (on-line) Sønderborg 2021

71 M. Soboń, M. Strojecki, Ch. Bertolin "Impact of dynamic environmental variations on massive wooden cultural objects", COLLECTION CARE: New Challenges in Preventive Conservation, Predictive Analysis and Environmental Monitoring, (on-line) Valencia 2021

72 M. Strojecki "Acoustic emission for assessing climate-induced risk of mechanical damage in stave churches", SyMBoL - Sustainable Management of heritage Buildings in a Long-Term prospective - Final conference, (on-line) Trondheim 2021

73 J. Szaleniec, A. Gibała, M. Oćwieja, P. Żeliszewska, M. Szaleniec, T. Gosiewski "Zastosowanie nanocząstek srebrauzyskanych przy użyciu kwasu taninowego do zwalczania patogenów izolowanych od chorych z przewlekłym zapaleniem zatok przynosowych", XVIII Konferencja Naukowo-Szkoleniowa XIII Konferencja Polskiego Towarzystwa Audiologicznego i Foniatrycznego Otorynolaryngologia 2021, (on-line) 2021

74 M. Szaleniec, A. Sekuła, I. Salii, A. Alhaj Zein, D. Seyhan, J. Heider "Determinants for substrate recognition in benzylsuccinate synthase from Thauera aromatica - targeted mutagenesis and MD simulations", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

75 M. Szaleniec, A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider "A novel hydrogenase activity of tungsten aldehyde oxidoreductase from *Aromatoleum aromaticum*", 63. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

76 M. Szaleniec, A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, A. Seubert, J. Schuller, J. Heider "A tungsten enzyme is a hydrogenase, reducing carboxylic acid with electron bifurcation", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków2021

77 K. Szczepanowicz, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska "Theranostic nanocarriers of anticancer drugs", 11th International Conference, Poznań 2021

78 M. Szczęch, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Fluorine-based theranostic multilayer nanocarriers", 35th conference of the European Colloid & Interface Society ECIS 2021, Athens 2021

79 M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska "PAMAM dendrimers as nanocarriers for 5-fluorouracil: effectiveness of complex formation and cytotoxicity studies", Spring 2021 American Chemical Society National Meeting, (on-line) USA 2021

80 M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska "Poly(amidoamine) dendrimers as nanocarriers for anticancer drugs and their interactions with plasma proteins", Interfaces International Conference From new materials to life science – Structure, Interactions, Dynamics and Activity, Pula 2021

81 M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska "PAMAM dendrimers as effective 5-Fluorouracil delivery systems", II Sympozjum Biomateriały w Medycynie i Kosmetologii, (on-line) 2021

82 M. Szpytma, A. Koziol Rachwal, J. Korecki, M. Slezak, P. Drozdz, W. Janus, H. Nayyef, M. Zajac, T. Slezak "Beating the limit of ordering temperature of FeO with antiferromagnetic proximity in FeO/CoO", IEEE International Magnetics INTERMAG 21 Virtual Conference, 2021

83 M. Śliwa, R. Socha, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B. Napruszewska "Copper based catalysts for ethanol steam reforming", 53 Polish Annual Conference on Catalysis, Kraków 2021

84 S. Świątek, P. Komorek, G. Turner, B. Jachimska "β-lactoglobulin as a platform for designing biologically active carriers – experimental and computational studies", 1st Symposium on Theranostics, Kraków 2021

85 M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovič "Effects of temperature, pH and additives on the activity of R-specific 1-(4-hydroxyphenyl)- ethanol dehydrogenase from Aromatoleum aromaticum", 47th International Conference of the Slovak Society of Chemical Engineering, SSCHE 2021, (on-line) Bratislava 2021

86 M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovič "Stability and inactivation of (R)-1-(4-hydroxyphenyl)- ethanol dehydrogenase from A. aromaticum", 63. Zjazd naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

87 M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovič "Thermal inactivation and aggregation of (R)-1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenase from *A. aromaticum*", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

88 J. Van Lindt, A. Bratek-Skicki, P. N. Nguyen, D. Pakravan, L. F. Durán-Armenta, A. Tantos, R. Pancsa, L. Van Den Bosch, D. Maes, P. Tompa "A generic approach to study the kinetics of liquid–liquid phase separation under near-native conditions", PhasAge International Conference, Phase Transitions in Aging and age-Related Diseases, on-line 2021

89 A. Walczyk, R. Karcz, A. Michalik, B.D. Napruszewska,D. Duraczyńska, J. Kryściak-Czerwenka, E.M. Serwicka, P. Jeleń, M. Sitarz "Physicochemical characterisation of mechanochemically and alkali activated talc", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

90 A. Walczyk, A. Michalik, B.D. Napruszewska, J. Kryściak-Czerwenka, R. Karcz, D. Duraczyńska, R.P. Socha, Z. Olejniczak, A. Gaweł, A. Klimek, M. Wójcik-Bania,

K. Bahranowski, E.M. Serwicka "New insight into the alkali activation of sepiolite - impact on composition, structure and texture", School of Catalysis, Liblice 2021

91 P. Warszyński, E. Jarek, Z. Krasińska-Krawet, T. Kruk, L. Lamch, S. Ronka, K.A. Wilk "Effect of the Linker on Adsorption Properties of Soft Hydrophobically Functionalized PSS/MA Polyelectrolytes", ECIS 2021, Ateny 2021

92 P. Warszyński, E. Jarek, Z. Krasińska-Krawet, T. Kruk, Ł. Lamch, S. Ronka, K. A. Wilk "Properties of Soft Hydrophobically Functionalized PSS/MA Polyelectrolytes", 35th Conference of the European Colloids &Interface Society, ECIS 2021, Ateny 2021

93 A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider, M. Szaleniec "A new type of hydrogenase - tungsten aldehyde oxidoreductase from Aromatoleum aromaticum", MoTeC-12th Molybdenum and Tungsten Enzymes Conference, Marsylia 2021

94 A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider, M. Szaleniec "Tungsten Aldehyde Oxidoreductase – a new type of hydrogenase", Biotrans -15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Graz 2021

95 A. Winiarska, D. Hege, J. Kryściak-Czerwenka, A. Seubert, J. Schuller, J. Heider, M. Szaleniec "A tungsten enzyme is a hydrogenase, reducing carboxylic acid with electron bifurcation", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

96 A. Winiarska, D. Hege, A. Seubert, J. Schuller, J. Heider, M. Szaleniec "Manifold application of biocatalytic production of NADH and aromatic/aliphatic aldehydes", Life Science Open Space, Kraków 2021

97 T. Witko "Budowa Modułu Biorafinerii" Dzień Otwarty Klastra Life Science, Kraków 2021

98 P. Wojtoń, T. Pańczyk, P. Wolski "Interakcje nanorurek węglowych z telomerycznym DNA zawierającym niekanoniczne formy G-quadruplex i i-motif", Fizykochemia Granic Faz – Metody Instrumentalne, Lublin 2021

99 M. Zimowska, H. Pálková, M. Śliwa, J. Gurgul "Sorption properties of Laponite-derived nanocomposites triggered by chemical and hydrothermal treatment", LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2021

100 P. Żeliszewska, M. Sadowska, M. Morga, Z. Adamczyk "Deposition efficiency of particles with fibrinogen corona on solid substrate", 63. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

POSTERY

1 A. Archała, A. Płazińska, W. Płaziński "Does polymorphism of the β2-adrenergic receptor influence its interactions with lipid bilayer and Gs protein?", X Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 2021

2 S. Balicki, Ł. Lamch, K. A. Wilk, P. Warszyński "Hydrophobically functionalized chitosan as a stabilizer for Pickering O/W emulsions", 35th European Colloid and Interface Science Society Conference, ECIS 2021, Athens 2021

3 M. Borkowski, J. Zawała "Influence of a magnetic field on the drainage mechanism of the thin liquid film (TLF) and real foams stabilized by magneto-reactive surfactants", 34th M. Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 27-29.09.2021, online 2021

4 E. Cichoń, J. Prajsnar, M. Guzik, J. Czechowska, S. Skibiński, P. Pańtak, A. Ślósarczyk, A. Zima "Foamed Calcium Phosphate Cements And Their Behaviour During Incubation In

Distilled Water", 30th conference "Biomaterials in medicine and veterinary medicine", Rytro 2021

5 A. Czakaj, M. Krzan, P. Warszyński "Surface properties of arginine-based surfactant Ethyl Lauroyl Arginate", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, (on-line), Łódź 2021

6 G. Delgado Soria, K. Freindl, J. Prieto, A. Quesada, J. De La Figuera, N. Spiridis, J. Korecki, J. Marco "Ultrathin $CoFe_2O_4$ Films Grown by Molecular Beam Epitaxy on Pt(111)", IEEE International Magnetics INTERMAG 21 Virtual Conference, 2021

7 A. Gibała, J. Szaleniec, D. Ochonska, M. Szaleniec, T. Gosiewski "Genotypical similarity of Staphylococcus aureus isolates from patients with chronic sinusitis", 31st European Congress of Clinical Microbiology & Infectious Diseases (ECCMID), (on-line), 2021.

8 A. Gibała, J. Szaleniec, M. Oćwieja, M. Szaleniec, T. Gosiewski "Tannic acid-stabilized silver nanoparticles -antibacterial and antibiofilm activity against clinical isolates from patients with chronic rhinosinusitis", 31st European Congress of Clinical Microbiology and Infectionous Diseases (ECCMID), (on-line) 2021

9 M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner, M. Oszajca, K. Świderek, V. Moliner, A. J. Bojarski, M. Szaleniec "QMMM and Kinetic Isotope Effect", Advances and Challenges in Biomolecular Simulations, EMBO Workshop, 2021

10 M. Glanowski, P. Wójcik, M. Procner. M. Oszajca. K. Świderek. V. Moliner. A. J. Bojarski, M. Szaleniec "QM/MM modeling of enzymatic D1-dehydrogenation of 3-ketosteroids and validation by kinetic isotope effect", International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, (on-line) Lyon 2021

11 K. Haraźna, E. Cichoń, S. Skibiński, T. Witko, D. Solarz, E. Marcello, M. Zimowska, A. Zima, M. Witko, I. Roy, M. Guzik "The differences in proliferation and cytotoxicity of MC3T3E1 cell line on tricalcium phosphate composites containing physically and chemically bonded diclofenac to polyhydroxyoctanoate (PHO) polymer", FEBS OPEN BIO 11 Ljubljana, 2021

12 K. Haraźna, A. Walczyk, E. Cichoń, M. Witko, B. Leszczyński, A. Wróbel, M. Guzik "Preparation of poly(3-hydroxyoctanoate) porous patches containing diclofenac modified oligomers as potential materials for biomedicine", 31st Conference of the European Society for Biomaterials together with the 43rd Annual Congress of the Iberian Society of Biomechanics and Biomaterials (SIBB), Porto 2021

13 K. Haraźna, A. Walczyk, M. Witko, M. Guzik „Charakterystyka 3-hydroksyalkanianowych nośników betametazonu”, 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

14 K. Harazna, M. Witko, A. J. Bojarski, M. Guzik "Novel functionalised biopolymer for implantology and dermatology applications", Drug Delivery Summer School 2021, Kongens Lyngby 2021

15 E. Jamróz, T. Kruk, P. Kulawik, M. Janik, P. Guzik "Innovative active biodegradable coatings with bioactive peptides based on biopolymer nanoemulsions for prolonging the shelf-life of meat products", ICoMST 2021, Kraków 2021

16 R. Karcz, B. D. Napruszewska, A. Walczyk, J. Kryściak-Czerwenka, A. Michalik, E.M. Serwicka "Baeyer-Villiger oxidation of cyclohexanone over Mg-Al hydrotalcite catalysts precipitated with different bases", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łodź 2021

17 A. Kluza, B. Mrugala, K. Kurpiewska, P.J. Porebski, E. Niedzialkowska, W. Minor, M.S. Weiss, M. Chruszcz, T. Borowski "On substrate binding cavity of hyoscyamine 6beta-hydroxylase from devil's trumpet", Twenty-Fifth Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Praga 2021

18 A.I. Klyndyuk, D.S. Kharitonov, M. Mosiałek, E.A. Chizhova, M. Zimowska, A. Komenda, R.P. Socha "Evaluation of layered oxygen-deficient $NdBa(Fe,Co,Cu)_2O_{5+\delta}$ double perovskites as cathode materials for solid oxide fuel cells", 6th ISSIS International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2021

19 Курило И. И., Касач А. А., Осипенко М. А., Харитонов Д. С. „Способ получения композиционных покрытий хитозан-TiO_2 на сплавах магния", Современные Электрохимические Технологии и Оборудование, материалы международной научно-технической конференции (Moderm electrochemical technologies and equipment), Минск, 2021

20 B. Lis, M. Dudek, A. Raźniak, T. Šalkus, A. Kežionis, S. Daugela, M. Mosiałek "$Ba_{1-x}M_xCe_{0.9}Y_{0.1}O_{3-d}$ – based electrolytes for reversible protonic fuel cells", 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2021

21 D. Lupa, Z. Adamczyk, P. Batys, W. Płaziński, M. Morga, A. Michna "Macroion Conformation in Electrolyte Solution – Modelling, Experiment and Slender Body Hydrodynamics", 34th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, on-line 2021

22 M. Mączka, M. Mosiałek, P. Pasierb "New cathode materials for Al-ion batteries", 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2021

23 M. Nattich-Rak, Z. Adamczyk "Tworzenie koron mioglobiny na powierzchniach mikrocząstek koloidalnych", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego (online) 2021

24 M. Nattich-Rak, A. Pomorska, P. Batys, Z. Adamczyk " Kinetyka adsorpcji mioglobiny na mice i sensorach krzemionce – rola oddziaływań elektrostatycznych ", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, (online) 2021

25 J. E. Olszowka, M. Skala, M. Lemishka, K. Mlekodaj, L. Kuterasinski, D. Rutkowska-Zbik, S. Sklenak, E. Tabor, J. Dedecek "Determination of Al Distribution in USY Zeolite", 52th Symposium on Catalysis, Prague 2021

26 M. A Osipenko, D. Kharitonov, A. Wrzesińska, A.A Kasach, I.I Kurilo "Effective inhibition of magnesium-lithium-aluminum alloys corrosion by sodium molybdate", 1st Corrosion and Materials Degradation, on-line, 2021

27 Осипенко М. А., Потихонин Д. Е., Харитонов Д. С., Курило И. И. „ Изучение коррозионного поведения сплава WE43 в присутствии перманганата калия", Химическая технология и техника: материалы 85-ой науч.-техн. конференции профес.-препод. состава, научн. сотрудников и аспирантов (с международным участием), Минск, 1–13 февраля 2021

28 Осипенко М. А., Харитонов Д. С., Касач А. А., Курило И. И. "Структурирование поверхности магниевых сплавов методом микродугового оксидирования" Международная научно-практическая конференция имени Д.И. Менделеева посвящённая 90-летию профессора Р.З. Магарила, Тюмень, 25–27 ноября, 2021

29 M. A. Osipenko, D. S. Kharitonov, A. Wrzesińska, A.A. Kasach, J. Adamiec, J. Ryl, I.I. Kurilo "The effect of sodium molybdate on corrosion of AZ31 magnesium alloy", 6th

international symposium on surface imaging/spectroscopy at the solid/liquid interface, Kraków 2021

30 A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski,.G. Mordarski, K. Szczepanowicz "The effect of the size of Ni-Ag core-shell nanoparticles on the conductivity of ink coatings", 35th conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2021, Athens 2021

31 H. Pálková, M. Barlog, J. Madejová, E. Šimon, M. Zimowska "Structural changes in mechanochemically treated smectites investigated by infrared spectroscopy", 8th Workshop of Slovak Clay Group. Clay Minerals and Selected Industrial Minerals in Material Science, Applications and Environmental Technology, Habovka 2021

32 J. Prajsnar, J. Staroń, A. Bojarski, M Witko, M. Guzik "Polyhydroxyalkanoates - Production Strategies And Their Application In Medicine", 30th conference "Biomaterials in medicine and veterinary medicine", Rytro 2021

33 K. Rakowski, B. Jachimska "BSA as a biologically active nanocarriers – computational studies", 1st Symposium on Theranostics, Kraków 2021

34 D. Rutkowska-Zbik, R. Tokarz-Sobieraj „Struktura geometryczna i elektronowa układów TiO_2/Ag i TiO_2/HPW – obliczenia DFT”, 63. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź, 2021

35 M. Sadowska, Z. Adamczyk, P. Żeliszewska "Applicability of quartz crystal microbalance technique for nano- and microparticle deposition kinetics: theoretical modeling and experiments", 63. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

36 A. Sekuła, M. Szaleniec, J. Heider "A computational study on enzymatic toluene degradation by benzylsuccinate synthase", International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, (on-line) Lyon 2021

37 S. Skibiński, P. Pańtak, E. Cichoń, M. Guzik, J. Czechowska, A. Ślósarczyk, A. Zima "Biodegradable Tricalcium Phosphate/poly(3-hydroxybutyrate) Scaffolds For Bone Tissue Regeneration", 30th conference "Biomaterials in medicine and veterinary medicine", Rytro 2021

38 A. Sławińska, K. Pamin, P. Serda, M. Oszajca , R. Karcz, W. Łasocha "Organic-inorganic peroxidomolybdenum hybrid compounds with derivates of pyridine acids as a catalyst in Baeyer-Villiger reaction", 2nd Virtual Congress on MATERIALS, on-line 2021

39 D. Solarz- Keller, Tomasz Witko, Maciej Guzik, Zenon Rajfur "MEF 3T3 cells reaction to PHO- biopolymer of bacterial origin", 11th International Conference Analytical Cytometry (CSAC), Ostrawa 2021

40 J. Szaleniec, A. Gibała, M. Oćwieja, P. Żeliszewska, M. Szaleniec, T. Gosiewski „Zastosowanie nanocząstek srebra uzyskanych przy użyciu kwasu taninowego do zwalczania patogenów izolowanych od chorych z przewlekłym zapaleniem zatok przynosowych”, Konferencja Otorynolaryngologia, (on-line) Łódź 2021

41 M. Szaleniec, A. Sekuła, A. Alhaj Zein, J. Heider "Radical C-C coupling catalyzed by glycyl radical enzyme, benzylsuccinate synthase from Thaurea aromatica", 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, (on-line) Graz 2021

42 M. Szaleniec, A. Sekuła, I. Salii, A. Alhaj Zein, D. Seyhan, J. Heider "Determinants for substrate recognition in benzylsuccinate synthase from Thaurea aromatica - targeted mutagenesis and MD simulations", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Warszawa 2021

43 W. Szczęsna, M. Tsirigotis-Maniecka, Ł. Lamch, K. A. Wilk, E. Zboińska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "New antimicrobial hydrophobized poly(acrylic acids) as functional coatings for curcumin-loaded hydrogel microparticles", 35th European Colloid and Interface Science Society Conference, ECIS 2021, Athens 2021

44 E. Szefer, T. Majka, A. Szeligowski, O. Zastawny, M. Guzik, K. Pielichowski "Preparation and thermal properties of a-PHA/PHB blends", 17th International Congress on Thermal Analysis and Calorimetry, ICTAC 2020, Kraków 2021

45 M. Szota, K. Reczyńska, E. Pamuła, O. Michel, J. Kulbacka, B. Jachimska "Physicochemical characteristic of poly(amidoamine) dendrimers are their application in controlled drug delivery systems", 1st Symposium on Theranostics, Kraków 2021

46 M. Tataruch, V. Illeova, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Polakovic "Stability and inactivation of (R)-1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenase from A. aromaticum. ", 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

47 M. Tataruch, K. Zaczyk, P. Wójcik, A. M. Wojtkiewicz, K. Szymańska, M. Szaleniec, „Efektywność procesów reaktorowych z zastosowaniem immobilizowanej Δ1-dehydrogenazy-3-ketosteroidowej”, 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Łódź 2021

48 J. Van Lindt, A. Bratek-Skicki, P. N. Nguyen, D. Pakravan, L. F. Durán-Armenta, A. Tantos, R. Pancsa, L. Van Den Bosch, D. Maes, P. Tompa "A generic approach to study the kinetics of liquid–liquid phase separation under near-native conditions", The 2021 FASEB Virtual Science Research Conference on Protein Aggregation, function, Dysfunction, and Disease, on-line, 2021

49 P. Weroński "Roughness spectroscopy of particle monolayer", 34th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, Krakow 2021

50 A. Winiarska, D. Hege, Y. Gemmecker, J. Heider, M. Szaleniec "Hydrogen-driven benzyl alcohol production by oxidoreductases from Aromatoleum aromaticum", 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Worldwide online, Graz 2021

51 A. Winiarska, J. Kryściak-Czerwenka, J. Heider, M. Szaleniec "Reduction of carboxylic acid catalysed by W-dependent aldehyde oxidoreductase from Aromatoleum aromaticum", 9. Międzyuczelniane Sympozjum Biotechnologiczne „Symbioza”, Warszawa 2021

52 Z. Wojdyła, A. Kluza, T. Borowski "Conrol of hydroxyltion regioseletivity by hysocyamine 6beta-hydroxylase as revealed by crystallographic and QM/MM studies", Twenty-Fifth Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Praga 2021

53 P. Wolski, T. Panczyk „Nanorurki węglowe skoniugowane z i-motif DNA jako platforma kontrolowanego uwalniania leków do terapii antynowotworowej”, Fizykochemia granic faz – metody intrumentalne, Lublin 2021

54 P. Wójcik, B. Mrugała, M. Glanowski, M. Procner, K. Kurpiewska, O. Zastawny, M. Guzik, M. Oszajca, M. Szaleniec "Δ1-Dehydrogenation of 3-ketosteroids by 3-ketosteroid dehydrogenase from Sterolibacterium denitrificans – structural and mechanistic studies", 15th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations, Worldwide online, Graz 2021

55 A. Wróblewska, B. Szermer-Olearnik, A. Szczygieł, J. Mierzejewska, K. Węgierek-Ciura, D. Kozień, Z. Pędzich, P. Żeliszewska, E. Pajtasz-Piasecka " Macrophages As Potential Carriers of Boron-Rich Compounds in Boron Neutron Capture Therapy", 6th European Congress of Immunology, (on-line), 2021

56 M. Zimowska, J. Gurgul, H. Pálková, L. Lityńska-Dobrzyńska, K. Łątka "Surface imaging of sonochemically and hydrothermally prepared Fe doped porous clay derived heterostructures", 6th ISSIS International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2021

57 M. Zimowska, M. Śliwa, R. P. Socha, H. Pálková "Surface segregation of the Mg species as a result of chemical and hydrothermal treatment of the Laponite-based nanocomposites", 8th Workshop of Slovak Clay Group. Clay Minerals and Selected Industrial Minerals in Material Science, Applications and Environmental Technology, Habovka 2021

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1 T. Borowski "Chemia obliczeniowa", Uniwersytet Jagielloński

2 Ł. Bratasz „Analiza ryzyka w ochronie dziedzictwa kultury”, Akademia Sztuk Pięknych

3 Ł. Bratasz "Konserwacja prewencyjna oraz zarządzanie ryzykiem w instytucjach muzealnych", Uniwersytet Jagielloński

4 Ł. Bratasz "Zarządzanie klimatem w dziedzictwie", Politechnika Krakowska

5 Ł. Bratasz "Sustainable managment of cultural heritage", Instytut Historii im. Tadeusza Manteuffla PAN

6 Ł. Bratasz "Nauka o dziedzictwie", IV LO w Tarnowie, którego IKiFP PAN jest patronem naukowym

7 M. Guzik "Bioplastiki przyszłości - synteza, modyfikacje i zastosowania" Meetoza - dzielimy się wiedzą Wykład dla Koła Naukowego Biotechnologów "Herbion”, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska

8 M. Guzik "Biorefinery for PHA production", University of Belgrade, Belgrad, Serbia

9 M. Guzik "Biorefinery for PHA production", University College Dublin, Dublin, Irlandia

10 M. Krzan "Pianotwórczośc i stabilność pian w układach wieloskładnikowych", Uniwersytecie Rolniczym im. Hugona Kołłątaja w Krakowie

11 P. Mazalski “Temperaturowa zmienność właściwości magnetycznych w nanostrukturze Au/Co/NiO”, Uniwersytet w Białymstoku

12 M. Oćwieja "Mono- and multilayers of plasmonic nanoparticles of tunable coverage, structure and charge" Uniwersytet w Maladze, Hiszpania

13 M. Ruggiero-Mikołajczyk “Fuel cell as a topic of my research”, Uniwersyt FORTH/ICE-HT Patras, Grecja

14 M. Szaleniec, M. Guzik "Projekty B+R związane z gospodarką odpadami i ekonomią cyrkularną w sektorze chemicznym. Bioplastiki bakteryjne i biogospodarka" Kraków 2021, Wirtualne posiedzenie Sektorowej Rady ds Kompetencji Przemysłu Chemicznego

15 M. Szaleniec, P. Wójcik, M. Glanowski, A. M. Wojtkiewicz, M. Procner, B. Mrugała, O. Zastawny, M. Guzik, E. Niedziałkowska, W. Minor, K. Świderek, V. Moliner, “…” Max-Plank Institute for Terrestrial Microbiology, Zentrum für Synthetische Mikrobiologie, Marburg, Niemcy

16 J. Zawała "Stability of liquid film under dynamic conditions”. Uniwersytet Stanforda, USA

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. dr hab. Arkadiusz Chworoś (Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN) "DNA/RNA i inne biomateriały oraz co się dzieje w CBMM PAN w Łodzi"
2. dr hab. Wojciech Hellwing (Centrum Fizyki Teoretycznej PAN) "Krótka historia Ciemnej Materii"
3. prof. dr hab. Roman Kozłowski "Zasady etyki w nauce – poradnik praktyczny"
4. dr Katrien Keune (Rijksmuseum Science Department, Amsterdam) "The degradation of ultramarine paints: a catalytic process? "
5. dr hab. Grzegorz Marzec (Instytut Badań Literackich PAN) "Czy między literaturą i chemią jest chemia? Humanistyczne i przyrodnicze powinowactwa z wyboru"
6. prof. dr hab. Jacek Młynarski (Instytut Chemii Oorganicznej PAN) "Cynk zamiast metali szlachetnych: enancjoselektywne reakcje redukcji i tworzenia wiązań węgiel-węgiel z zastosowaniem kompleksów cynku"
7. dr hab. Beata Nowicka, prof. UJ (Wydziału Chemii UJ) "Polimery i wielocentrowe układy koordynacyjne o właściwościach magnetycznych jako czujniki i przełączniki molekularne"
8. dr Łukasz Pęczek (Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN) "Szczepionki przeciwko SARS-CoV-2 - fakty, nie mity"
9. prof. dr hab. Michał Witt (Instytut Genetyki Człowieka PAN) "Na co chorował i co było przyczyną śmierci Fryderyka Chopina"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. dr hab. J. Barbasz "Fizykochemiczne aspekty układów "bio" - od białka do tkanki. "
2. dr hab. J. Barbasz "Bariera i potencjał – nieoczywiste aspekty fizykochemii"
3. dr hab. M. Guzik "Nowoczesne materiały i bioaktywne związki. Nieodkryty potencjał polihydroksyalkanianów."
4. dr M. Krzan, dr R. Gryboś, prof. dr hab. M. Szaleniec "Polityka równości Płci, Antymobingowa oraz Bezpieczeństwa informacji"
5. dr hab. M. Łukomski "Mechanika warstw malarskich w mikroskali"
6. dr hab. M. Oćwieja, dr M. Rugierro, "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+"

UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

PROFESORA

1 Łukasz Bratasz

2 Wojciech Płaziński

DOKTORA HABILITOWANEGO

1 Piotr Batys „Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów”

2 Anna Bratek-Skicki „Adsorpcja białek na nośnikach polimerowych do zastosowań biomedycznych”

3 Maciej Guzik „Polihydroksyalkaniany, bakteryjnie syntetyzowane polimery, jako źródło związków chemicznych do syntezy bioaktywnych cząsteczek i zaawansowanych materiałów”

DOKTORA

- **dziedzina nauk ścisłych i przyrodniczych., dyscyplina: nauki chemiczne**

1. Karolina. Golianek „Zastosowanie metod kwantowo-mechanicznych w celu badania struktury, konformacji oraz efektów stereoelektronowych w wybranych węglowodanach" (promotor dr hab. W. Płaziński)
2. Anna Kluza „6β-hydroksylaza hioscyjaminy z Datura metel – charakterystyka strukturalna i biochemiczna" (promotor prof. dr hab. T. Borowski)
3. Dawid Lupa „Plasmonic microcomposites with nonmetallic cores - preparation, properties and applications" (promotor dr hab. M. Oćwieja)
4. Beata Mrugała " „Badania strukturalne i charakterystyka biochemiczna enzymu KanJ zaangażowanego w biosyntezę kanamycyny" (promotorzy prof. dr hab. T. Borowski, prof. dr W. Minor)
5. Karina Nester „Rozwijanie oraz zastosowanie metod dynamiki molekularnej w badaniach konformacji cząsteczek cukrów prostych i złożonych" (promotor dr hab. W. Płaziński)
6. Małgorzata Smoliło-Utrata „Zeolity BEA i FAU z wprowadzonym wanadem jako katalizatory reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów" (promotor dr hab. D. Rutkowska-Żbik)
7. Marta Szczęch "Polymeric nanoparticles as nanocarriers of active agents" (promotor dr hab. K. Szczepanowicz)
8. Joanna Wojas „Adsorpcja CO na powierzchniach Fe_3O_4 (111) modyfikowanych metalami" (promotor prof. dr hab. N. Spiridis)
9. Zuzanna Wojdyła „Mechanizmy reakcji katalizowanych przez dioksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu – badania metodami biochemii obliczeniowej" (promotor prof. dr hab. T. Borowski)

- **dziedzina nauk ścisłych i przyrodniczych., dyscyplina: nauki fizyczne**

1 Arkadiusz Janas „Synteza i badanie właściwości strukturalnych i elektronowych metalicznych nanostruktur na powierzchniach dwuskładnikowych kryształów półprzewodnikowych"

2 Konrad Skowron "Properties of the nanocrystalline layers obtained by method of severe plastic deformation in metals and alloys for biomedical applications"

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

1 LIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (LIII Polish Annual Conference on Catalysis), Kraków 22-24 września 2021 (M. Witko, D. Rutkowska-Żbik)-online

2 6th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface 6-9 czerwca 2021, Kraków (G. Mordarski) online

3 34th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics Zakopane 27-29 listopada 2021 (J. Barbasz-IKiFP PAN, Wydział Fizyki UJ, Mark Kac Complex System Research Center)-online

4 Life Science Open Space Online Week 2021, Kraków 23-26 listopada 2021 (Klaster LifeScience Kraków, M. Guzik-IKiFP PAN (*organizacja jednej z sesji*))