



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



**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2017**



Kraków, marzec 2018

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2017	9
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2017	13
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2017	19
Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący	19
Działalność statutowa Instytutu	23
Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"	55
Projekty badawcze NCN "Sonata"	61
Projekty badawcze NCN "Opus"	71
Projekty badawcze NCN "Preludium"	85
Projekty badawcze NCN "Fuga"	91
Projekty badawcze NCN "Miniatura"	95
Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"	99
Projekty badań stosowanych NCBiR	103
Projekty NCBiR "Lider"	107
Projekty FNP "Homing"	111
Projekty Akcji COST UE	115
Inne międzynarodowe projekty badawcze	119
Projekty Programu Erasmus+	123
Inne opracowania badawcze	127
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2017	131
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	131
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	161
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	189

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

Teoria i eksperyment w badaniach podstawowych i aplikacyjnych

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

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

Działalność badawcza Instytutu obejmuje cztery podstawowe kierunki:

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

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

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

Jednym z głównych celów prac badawczych prowadzonych w Instytucie w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych jest opis zjawiska adsorpcji oraz wyjaśnienie mechanizmu tworzenia i stabilności pian, nanocząstek i cząstek koloidalnych, a także ich oddziaływań. Drugi ważny i prężnie rozwijany dział badań z tego obszaru dotyczy procesów mikroenkapsulacji i zwiększania biokompatybilności materiałów, które mogą znaleźć zastosowania w nowoczesnych metodach diagnostycznych i terapeutycznych.

Rezultatami prowadzonych badań są osiągnięcia aplikacyjne obejmujące opracowanie nowych katalizatorów do produkcji bio-paliw, wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych oraz udoskonalanie metod służących ochronie zabytków. W zakresie badań podstawowych głównymi osiągnięciami Instytutu w roku 2017 jest określenie właściwości magnetycznych układu CoO/Fe(001): exchange-bias w funkcji grubości warstw i temperatury,

modyfikacja reaktywności katalizatorów palladowych przez wodorowe brzozy wolframowe, wyznaczenie kinetyki utworzenia kontaktu trójfazowego i flotacji kwarcu w czystych i mieszanych roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych, zsyntezowanie nowych suspensji nanocząstek srebra i złota.

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

Kształcenie

Instytut prowadził w 2017 roku studia trzeciego stopnia - studia doktoranckie w ramach Międzynarodowych Studiów Doktoranckich (MSD).

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

Instytut uczestniczy w europejskim programie wymiany naukowej studentów i pracowników naukowych Erasmus plus.

Współpraca krajowa i międzynarodowa

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

Dla rozwoju współpracy oraz możliwości prowadzenia badań interdyscyplinarnych Instytut utworzył wspólne laboratoria z wieloma instytucjami badawczymi: Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur, Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej, Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni, Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych i Medycznych, Narodowe Laboratorium Badania Powierzchni oraz Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej SPINLAB.

Rozwojowi badań interdyscyplinarny przysługuje się również uczestnictwo Instytutu w pracach kilku krajowych sieci i konsorcjów badawczych: Polskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, Krajowego Konsorcjum „Polski Synchrotron”, Klastra Life-Science, Konsorcjum "Kataliza w ochronie środowiska" i Konsorcjum Nanotech.

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

Instytut prowadzi szeroką współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w licznych porozumieniach o współpracy dwustronnej, projektach badawczych kolejnych Programów Ramowych Unii Europejskiej i Europejskiego Obszaru Gospodarczego, a także

Programach Operacyjnych Innowacyjna Gospodarka i Kapitał Ludzki, współfinansowanych przez Komisję Europejską.

Instytut aktywnie uczestniczy w akcjach Inicjatywy COST (w 2017 roku w 2 programach).

Popularyzacja nauki

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

Instytut bierze aktywny udział w organizacji corocznego Festiwalu Nauki na Rynku Głównym w Krakowie.

ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2017

Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący (MNiSW)

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

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1. Nowe źródła energii; materiały i procesy. Modyfikacja reaktywności katalizatorów palladowych przez wodorowe brązy wolframowe 27
2. Nowe perokso- oraz poliokso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania 29
3. Katalityczne układy tlenkowe do otrzymywania produktów o wysokiej wartości dodanej – komponentów paliw i tworzyw sztucznych. 30
4. Uwodornienie ketonów w obecności katalizatorów metalicznych na nośnikach mikro- i mezoporowatych 31
5. Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych 32
6. Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu nadtlaniem wodoru na naturalnych minerałach zasadowych 33
7. Elektrochemiczne właściwości złota, jako materiału na konektory w ogniwach paliwowych z elektrolitem ze stałego tlenku 34
8. Procesy enzymatyczne – badania podstawowe i aplikacyjne. Wybrane enzymy oraz fotochemiczne uwalnianie CO - badania obliczeniowe 35
9. Eksperymentalny i teoretyczny opis heteropolizwiązków, modyfikowanych w pozycji jonu centralnego i kationu kompensującego 36

Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria

10. Nowe materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe 39
11. Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni. Właściwości magnetyczne układu CoO/Fe(001): exchange-bias w funkcji grubości warstw i temperatury 40
12. Badania wpływu parametrów mikroskopowych i fizykochemicznych na możliwość kontroli właściwości układów o potencjalnym znaczeniu biomedycznym. Wymuszone zmiany strukturalne w wybranych oligosacharydach 42

Nanostruktury materii miękkiej

13. Określenie topologii monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe oraz mechanizmów ich oddziaływań z ligandami jonowymi i makrocząsteczkowymi. Wyznaczenie efektywności wiązania kationów dwuwartościowych przez warstwy albuminy osocza krwi 45
14. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych. Kinetyczne aspekty formowania wielowarstw cząstek kulistych metodą "warstwa po warstwie" 46
15. Kinetyka powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni kwarcu w roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych 47
16. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe 48

17. Właściwości surfaktantów degradowalnych jako emulsyfikatorów/stabilizatorów nanoemulsji. Opis adsorpcji surfaktantów degradowalnych typu esterquat lub aminoquat na swobodnej powierzchni **49**

Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

18. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki mikroklimatu w ich otoczeniu. Ilościowa ocena zagrożeń zabytkowego pergaminu i drewna przez warunki mikroklimatu **53**

KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"

1. ST4 [2013-2017] Wspomagane komputerowo projektowanie i przewidywanie właściwości nośników leków opartych na strukturze nanorurek węglowych **57**
2. NZ1 [2015-2020] Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu w biosyntezie alkaloidów o aktywności farmakologicznej – struktury, mechanizmy reakcji i racjonalne przeprojektowywanie enzymów **58**
3. ST4 [2016-2020] Pole siłowe mechaniki molekularnej dla badania struktury, dynamiki oraz konformacji węglowodanów zawierających jednostki furanozowe **59**

Projekty badawcze NCN "Sonata"

1. ST5 [2012-2017] Wcelowane dostarczanie leków - synteza i funkcjonalizacja nanonośników **63**
2. ST4 [2013-2017] Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium denitrificans* **64**
3. ST4 [2013-2017] Mechanizm i kinetyka koalescencji pęcherzyków powietrza na spokojnych i zaburzanych z kontrolowaną częstotliwością powierzchniach ciecz/gaz **65**
4. ST4 [2015-2017] Nowe biwarstwowe układy białkowe oparte na oddziaływaniach antygen-przeciwciało – charakterystyka fizykochemiczna in situ **66**
5. Biosynteza nowych estrów laktozy za pośrednictwem lipaz. Charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i przeciwrakowych **66**
6. ST4 [2016-2019] Mechanizmy tworzenia i funkcjonalność multiwarstw nanocząstek zawierających biokompatybilne molekuly **67**
7. ST4 [2016-2019] Bio oligo/polisacharydy pod wpływem sił zewnętrznych **68**
8. ST4 [2017-2020] Wpływ struktury krystalograficznej ZrO₂ na aktywność katalizatorów Cu/ZrO₂ i Cu/ZrO₂-ZnO domieszkowanych Ga, Mn i Ni w reakcji niskotemperaturowego reformingu parowego bio-etanolu **69**

Projekty badawcze NCN "Opus"

1. ST5 [2014-2017] Synteza kompozytów zawierających nanocząstki metali (Fe, Mn, Pd) i porowate, domieszkowane azotem materiały węglowe o różnej morfologii ziaren oraz charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych w reakcji redukcji tlenu **73**
2. ST5 [2014-2017] Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania na osnowie organosmektytów interkalowanych odwróconymi micelami zawierającymi nanostruktury typu wodorotlenków i hydrotalkitów **74**
3. NZ1 [2015-2018] Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu katalizujące atypowe reakcje utleniania – badania nad strukturami oraz mechanizmami enzymatycznymi **75**
4. ST5 [2016-2019] Teranostyczne nanonośniki do obrazowania MRI **76**

5. ST5 [2016-2019] Hierarchiczne katalizatory zeolitowe typu Y i omega nowej generacji: badania zaawansowanymi metodami IR, NMR oraz modelowanie strukturalne	77
6. ST5 [2016-2019] Monowarstwy nanocząstek o kontrolowanej heterogeniczności i strukturze jako efektywne substraty antyadhezyjne	78
7. ST3 [2017-2020] Magnetyczne nanocząstki na periodycznych matrycach tlenków żelaza: stabilizacja magnetyzmu i jego kontrola zewnętrznym polem magnetycznym	79
8. ST8 [2017-2020] Opracowanie nowoczesnej technologii wytwarzania stabilnych biologicznych filmów powierzchniowych o właściwościach drobnoustrojóbójczych i leczniczych	80
9. ST4 [2017-2020] Mechanizm regioselektywnego utleniającego odwodornienia 3-ketosteroidów przez dehydrogenazę D1-cholest-4-en-3-onu ze <i>Sterolibacterium denitrificans</i>	81
10. ST4 [2017-2020] Teoretyczne i doświadczalne badania mechanizmu reakcji utleniającego odwodornienia lekkich alkanów katalizowanej przez hierarchiczne materiały zeolitowe zawierające wanad	82
11. ST8 [2017-2020] Wpływ przeciwjonów na tworzenie i funkcjonalność membran polielektrolitowych	83
12. ST5 [2017-2020] Dendrymery jako platforma do projektowania biologicznie czynnych nośników	84

Projekty badawcze NCN "Preludium"

1. ST4 [2016-2017] Filmy polielektrolitowo-lipidowe z wbudowanymi hydrofobowymi nanocząstkami	87
2. ST5 [2017-2019] Synteza biopolimerowych nanocząstek hybrydowych	88
3. ST4 [2017-2019] Funkcjonalne hybrydowe nanomateriały na bazie dendrymerów poli(amidoaminowych) PAMAM	89

Projekty badawcze NCN "Fuga"

1. ST3 [2015-2018] Wysokorozdzielcza analiza przestrzennych właściwości strukturyzowanych nanostruktur magnetycznych	93
2. ST4 [2015-2018] Wpływ promieniowania elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni na oddziaływanie białek z powierzchniami stałymi	94

Projekty badawcze NCN "Miniatura"

1. ST4 [2017-2018] Rola wodorowych brązów molibdenowych i wolframowych w uwodornieniu biosuwrowca 5-(hydroksymetylo)furfuralu na katalizatorach Pd/MoO ₃ i Pd/WO ₃	97
2. ST5 [2017-2018] Stabilizacja aktywności katalitycznej dehydrogenazy 1-(R)-fenyloetanolowej poprzez immobilizację na polilizynie	98

Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"

1. [2016-2019] Określenie wpływu właściwości powierzchniowych nanocząstek srebra na ich aktywność cytotoksyczną wobec wybranych komórek ludzkiego układu immunologicznego oraz komórek tkanki łącznej właściwej	101
---	-----

Projekty badań stosowanych NCBiR

1. [2013-2017] HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych (MN)	105
---	-----

Projekty NCBiR "Lider"

1. [2017-2019] Nowe sfunkcjonalizowane biopolimery do zastosowań medycznych **109**

Projekty FNP "Homing"

1. [2017-2019] Rozwinięcie metodologii syntezy i stabilizacji nanocząstek metali w celu otrzymywania materiałów przewodzących **113**

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty Akcji COST UE

1. EC COST CM 1305 [2012-2018] ECOSTBio Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry **117**
2. EC COST CA15124 [2016-2020] NEUBIAS A New Network of European Bioimage Analyst to Advance Life Science Imaging **118**

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. [2016-2018] Organo-Clays as Intermediates for the Synthesis of Functional Hybrid Materials (projekt współpracy PAN - AN Słowacji) **121**
2. [2017-2019] Biocompatible Particle-Stabilized Foams and Emulsions as Carriers for Healing Agents [projekt współpracy PAN-CNR] **122**

Projekty Programu Erasmus+

1. Program międzynarodowej wymiany naukowców Erasmus+ "Mobilność edukacyjna" **125**

INNE OPRACOWANIA BADAWCZE

1. Szorstkość modelowych powierzchni przypadkowych **129**

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘC INSTYTUTU W ROKU 2017

W ROKU 2017:

realizowano:	18 statutowych zadań badawczych 31 projektów badawczych (grantów) MNiSW, NCBiR, NCN 2 projekty UE COST Action 1 projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej 2 inne projekty międzynarodowe
opublikowano:	1 monografię 4 rozdziały w monografiach 110 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy Journal Citation Reports (lista A) (oraz 3 ogłoszonych elektronicznie) 4 publikacje w czasopismach recenzowanych z listy MNiSW (lista B) 6 publikacji w innych czasopismach, 154 streszczenia referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	2 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wyłożono i zaprezentowano:	119 referatów i komunikatów (w tym 27 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 140 posterów
otrzymano: dokonano:	5 patentów krajowych 2 zgłoszeń patentowych
we współpracy z zagranicą:	opublikowano 39 wspólnych prac w czasopismach naukowych ogłoszono 25 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 106 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę
zorganizowano:	4 konferencje i posiedzenia naukowe Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki
tytuł profesora:	uzyskała 1 osoba
stopień doktora habilitowanego:	uzyskała 1 osoba
stopień doktora:	uzyskało 10 osób

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2017

– wyniki uzyskane w ramach projektów/ zadań badawczych

Właściwości magnetyczne układu CoO/Fe(001): exchange-bias w funkcji grubości warstw i temperatury

(zadanie statutowe "Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni")

Wykonano kompleksowe badania efektu exchange-bias w układzie cienkowarstwowym CoO/Fe(001) o zmiennej grubości wykorzystując obrazowanie mikroskopowe oparte na zjawisku Kerr. Temperaturowe zależności pola koercji oraz pola exchange-bias pozwoliły na określenie wartości krytycznych występowania anizotropii wymiany w takich układach. Parametry te są kluczowe przy projektowaniu elementów spintronicznych do zastosowania w głowicach twardych dysków opartych na zjawisku gigantycznego magnetooporu.

Modyfikacja reaktywności katalizatorów palladowych przez wodorowe brązy wolframowe

(zadanie statutowe "Nowe źródła energii; materiały i procesy")

Badania dotyczyły wykorzystania reaktywnego wodoru zawartego w strukturze brązów wolframowych tworzonych *in situ* w katalizatorach pallad-tlenek wolframu w uwodornieniu związków karbonylowych, m.in. bio-reagenta furfuralu. Obecność brązów skutkowała znaczącym wzrostem szybkości reakcji i wzrostem selektywności uwodornienia nienasyconych wiązań węgiel-węgiel jako wynik obecności nowych, dodatkowych centrów aktywnych o reaktywności modyfikowanej przez właściwości kwasowe tlenku wolframu.

– osiągnięcie działalności naukowej jednostki o znaczeniu ogólnospołecznym lub gospodarczym związane z działalnością naukową

Kinetyka utworzenia kontaktu trójfazowego i flotacji kwarcu w czystych i mieszanych roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych

(zadanie statutowe: "Kinetyka powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni kwarcu w roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych")

Wyjaśniono efekt wzrostu uzysku flotacyjnego kwarcu w mieszaninie kationowej i niejonowej substancji powierzchniowo-aktywnej (SPA) w stosunku do czystego roztworu jonowej SPA. Wykazano, że do tworzenia kontaktu trójfazowego (TPC) na powierzchni kwarcu dochodzi tylko w obecności kationowego surfaktantu. Dodatek niejonowej SPA znacznie przyspiesza utworzenie TPC i polepsza odzysk flotacyjny kwarcu, głównie za sprawą obniżenia prędkości pęcherzyków i wydłużenia czasu kontaktu z powierzchnią stałą.

Synteza suspensji nanocząstek srebra i złota

(projekt badawczy NCN OPUS UMO-2015/19/B/ST5/00847 "Monowarstwy nanocząstek o kontrolowanej heterogeniczności i strukturze jako efektywne substraty antyadhezyjne")

Opracowano unikatową metodę syntezy stabilnych suspensji nanocząstek srebra i złota o dodatnim ładunku powierzchniowym i kontrolowanym rozmiarze. Częstki takie wykazują wysoką efektywność adhezji do ujemnie naładowanych powierzchni biologicznych (membrany komórkowe) oraz przemysłowych (np. krzemionka koloidalna). W związku z tym materiały te mogą znaleźć szeroki obszar zastosowań jako substancje biobójcze, do wytwarzania leków przeciwnowotworowych oraz w katalizie heterogenicznej.

- zastosowania wyników badań naukowych lub prac rozwojowych o znaczeniu społecznym i gospodarczym; działania zwiększające innowacyjność

Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu nadtlaniem wodoru na naturalnych minerałach zasadowych

(zadanie statutowe "Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu nadtlaniem wodoru na naturalnych minerałach zasadowych")

Celem badań była ocena aktywności katalitycznej serii minerałów w reakcji utleniania cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu. W przypadku próbek mielonych, o niewielkiej zawartości żelaza uzyskano wydajności wyższe niż dla referencyjnego katalizatora syntetycznego. Wykazano więc, że krajowe minerały mogą być zastosowane jako tanie i przyjazne środowisku katalizatory, a ich aktywność katalityczna może być w znacznym stopniu zwiększona poprzez odpowiednio zoptymalizowane mielenie.

Ilościowa ocena zagrożeń zabytkowego pergaminu i drewna przez warunki mikroklimatu

(zadanie statutowe "Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki mikroklimatu w ich otoczeniu")

Uzyskano szczegółowe informacje o odpowiedzi wilgotnościowej i mechanice pergaminu - materiału historycznego szczególnie podatnego na uszkodzenia w zbiorach bibliotecznych i archiwalnych. Określono odkształcenie krytyczne, powyżej którego następuje trwała deformacja pergaminu. Ustalony algorytm opisujący zagrożenie pergaminu przez uszkodzenia dodano do oprogramowania HERIE – internetowego narzędzia do ilościowej oceny fizycznego zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania klimatyczne.

- rezultaty współpracy międzynarodowej,

Monitorowania i pomiary rozwoju mikrouszkodzeń obiektów referencyjnych z kolekcji National Trust metodą emisji akustycznej

Stosując pomiar emisji akustycznej - fal dźwiękowych emitowanych przez materiały w czasie pękania – zbadano powstawanie mikrouszkodzeń w cennych meblach w historycznej rezydencji Knole w Wielkiej Brytanii, należącej do National Trust. Zmierzone przyrosty pęknięć nie przekraczały setnych milimetra w ciągu roku i wskazywały na bezpieczne warunki w otoczeniu zabytków. W niektórych obiektach wysoka aktywność akustyczna skorelowana z temperaturą ujawniła zarażenie drewna owadami niszczącymi.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2017:

W roku 2017 zorganizowano 4 konferencje i posiedzenia naukowe, Dzień Otwarty Instytutu, stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 12 czerwca 2017

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

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

- J. Barbasz "Oglądamy niewidzialne"
- W. Łasocho "Kwarc - pospolity, niepospolity minerał"
- A. Micek-Ilnicka "Niezwykłe formy węgla - od fullerenu do grafenu"
- K. Kurpiewska "Komunikacja kolorami i fizykochemiczna tajemnica kameleonów"
- D. Rutkowska-Żbik "Polimery, plastiki i tworzywa (nie zawsze) sztuczne"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Micro- i nano-świat widziany w mikroskopie skaningowym
- Łatwopalni
- Owocowe baterie
- Białka do zadań specjalnych
- Wcelowane dostarczanie leków-synteza i funkcjonalizacja nanonośników
- W kolorowym świecie barwników
- Chemia od kuchni
- Temperatura, ciśnienie i my
- Konwertery energii
- Obrazy malowane światłem
- Termowizja
- Czy białe jest białe?

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- 49 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 15-17 marca 2017
- European School on Interfacial Engineering: Fundamentals, Applications, and Analytical Methods, ESIE 2017, Kraków 3-6 kwietnia 2017
- PANel Wiedzy – spotkanie naukowe Rady Samorządu Doktorantów Polskiej Akademii Nauk, Kraków 19 maja 2017
- 8th World Congress on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Krakow 3-8 września 2017

Organizacja imprez popularno-naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- 17. Festiwal Nauki i Sztuki "W zgodzie z naturą", Rynek Główny, Kraków 25-27 maja 2017
- Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 12 czerwca 2017

KRAJOWY NAUKOWY OŚRODEK WIODĄCY

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



Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący MNiSW [2012-2017]

(koordynator: prof. Małgorzata Witko)

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

W okresie sprawozdawczym, tj. w roku 2017, Instytut podjął szereg przedsięwzięć dla zintensyfikowania wspólnych badań pracowników instytucji członkowskich Konsorcjum. Realizowano przyznane w drodze konkursu 3 granty wspomagające wspólne projekty pracowników Instytutu z badaczami z instytucji partnerskich obejmujących różną tematykę:

1. „Synteza octanu etylu z bioetanolu na drodze jednoetapowej reakcji utleniania w obecności katalizatorów opartych na palladowych solach heteropolikwasów” (dr inż. Urszula Filek; współpraca z Wydziałem Chemii UJ)
2. „Wyznaczenie mechanizmów funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek plazmowych wybranymi aminokwasami i merkaptaminami w celu poszerzenia ich użyteczności w zastosowaniach biologicznych” (dr Magdalena Oćwieja; współpraca z Instytutem Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN oraz Wydziałem Chemii UJ)
3. „Analiza kinetyki adsorpcji wyłącznie na podstawie struktury końcowych monowarstw adsorpcyjnych” (dr hab. inż. Jakub Barbasz; współpraca z Wydziałem Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ)

Wyplacanych było 6 rocznych stypendiów doktoranckich "Smoluchowski Doctoral Scholarships" przyznanych w drodze konkursu szczególnie utalentowanym słuchaczom studium doktoranckiego Instytutu.

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

1. Dr Francesca Ravera, Institute of Condensed Matter Chemistry and Technologies for Energy, Padwa, Włochy
2. Prof. Georg Papastavrou, University of Bayreuth, Bayreuth, Niemcy
3. Dr. Wuge Briscoe, University of Bristol, Bristol, Wielka Brytania
4. Dr. Jean Daillant, Soleil Synchrotron, Gif-sur-Yvette, Francja.
5. Prof. Hubert Motschemann, Regensburg University, Regensburg, Niemcy
6. Prof. Vicente Cortes-Corberan, Spanish National Research Council, Madryt, Hiszpania

Instytut brał również udział w akcji FOKUS o nazwie „ArtMet” koordynowanej przez Wydział Chemii UJ i dotyczącej interdyscyplinarnych badań obiektów metalowych.

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1. Nowe źródła energii; materiały i procesy

Modyfikacja reaktywności katalizatorów palladowych przez wodorowe brązy wolframowe

(prof. Alicja Drelinkiewicz, dr Erwin Lalik, dr Robert Kosydar, dr Aleksandra Pacuła, dr Monika Góral-Kurbiel, mgr Michał Kołodziej, dr Tomasz Szumelda)

Celem badań było określenie wpływu brązów wodorowych (H_xWO_3) tworzonych w układach nanocząstki palladu - tlenek WO_3 lub H_2WO_4 (c- WO_3) na przebieg procesów z udziałem wodoru: katalityczne uwodornianie reagentów zawierających wiązania $C=C/C=O$ (furfural, aldehyd cynamonowy) oraz wydzielania wodoru z roztworu wodnego elektrolitu.

Badania obejmowały syntezę dwu serii katalizatorów Pd/WO_3 i $Pd/c-WO_3$ o zawartości palladu (0.5 - 4 % wag) (impregnacja roztworem $Pd(ac)_2$, redukcja H_2 250°C), charakteryzowanych metodami BET, XRD, XPS, SEM, HRTEM. Tworzenie brązów wodorowych (oznaczenie H/WoO_3 , Q kJ/mol WO_3) badano metodą kalorymetrii przepływowej (22°C, p atm). Wydzielanie wodoru z roztworu 0.5 M H_2SO_4 badano metodą CV (Pd/WoO_3 -węgiel Vulcan XC72 (1/1 w/w)).

Uzyskane wyniki. Katalizatory serii Pd/WO_3 o niskiej powierzchni właściwej (6-8 m^2/g) zawierały WO_3 o strukturze jednoskośnej, $Pd/c-WO_3$ wykazywały wyższą powierzchnię (13-30 m^2/g) oraz WO_3 o strukturze tetragonalnej, wytworzony w trakcie wstępnej redukcji wodorem. W obydwu seriach cząstki Pd były o podobnej wielkości 6-8 nm, jak i obok metalicznego Pd^0 (ok. 70 %) obecne były częściowo utlenione formy palladu ($Pd^{\delta+}$) wskazujące na wpływ matryc tlenkowych. Sorpcja wodoru przez katalizatory serii Pd/WO_3 zachodziła powoli a wyznaczone wartości H/WO_3 (0.33), jak i ciepła procesu (11.1 kJ/mol WO_3) są zgodne z literaturą ($H_{0.35}WO_3$, 9.6 ± 0.8 kJ/mol WO_3) i były niezależne od zawartości Pd w katalizatorach (0.5-4 % wag). Dla katalizatorów serii $Pd/c-WO_3$ sorpcja wodoru zachodziła szybciej i uzyskano wyższe wartości H/WO_3 (0.39-0.44) oraz większy efekt cieplny procesu (15.5 - 18.8 kJ/mol WO_3) rosnący ze wzrostem zawartości Pd. Te różnice w tworzeniu brązów wodorowych wiązano z różną strukturą matrycy tlenkowej w seriach Pd/WO_3 i $Pd/C-WO_3$ katalizatorów.

W reakcji uwodorniania aldehydu cynamonowego (toluen, 25°C, p atm) katalizatory serii Pd/WO_3 charakteryzowała nieznacznie wyższa aktywność od $Pd/c-WO_3$. Selektywność reakcji (uwodornianie $C=C$ vs $C=O$) zmieniała się z zawartością Pd, najwyższą selektywność 95 % uwodorniania $C=C$, wyższą niż dla katalizatora referencyjnego 2%Pd/SiO₂ (85 %) uzyskano przy najniższej zawartości Pd (0.5%Pd/ WO_3). Szybkość uwodorniania oraz selektywność do $C=C$ wzrastały, gdy w reakcji stosowano mieszaninę $Pd/WO_3 + WO_3$ (lub $Pd/WO_3 + H_2WO_4$). Dla mieszanin katalizatora i tlenu wzrastała również ilość sorbowanego wodoru potwierdzając, że spill-over wodoru zachodził również "przez granice faz katalizator-tlenek. Efekty te wskazują, że wodór występujący w katalizatorach w formie brązu H_xWO_3 , jest wysoce mobilny i bierze udział w reakcji uwodorniania, sprzyjając uwodornianiu wiązań $C=C$ w cząsteczce aldehydu cynamonowego.

W reakcji uwodorniania furfuralu, bio-surowca (izopropanol, 35°C, 6 bar) katalizatory obu serii różniły się znacząco. Katalizator 4%Pd/ WO_3 był znacznie mniej aktywny od 4%Pd/c- WO_3 , którego aktywność była porównywalna do 2%Pd/C. Katalizator 4%Pd/c- WO_3 charakteryzowała wysoka selektywność tworzenia nienasyconego alkoholu furfurylowego (75 %), znacząco przewyższającą selektywność dla Pd/C (50 %). W obecności mieszaniny $Pd/c-WO_3 + H_2WO_4$ obserwowano ponadto tworzenie eteru (furfuryl izopropyl eter), co można przypisać właściwościom kwasowym tlenu.

W procesie wydzielania wodoru (elektroliza wody w ogniach paliwowych) obecność WO_3 spowodowała znaczący wzrost aktywności Pd/ WO_3 w stosunku do Pd/C. Aktywność (potencjał, gęstość prądu) zależała od zawartości Pd. Metoda CV pokazała, że tworzenie brązów wodorowych zaburzało wydzielanie wodoru. Udział tego procesu malał ze wzrostem zawartości Pd, optymalną aktywność wykazywał 4 % Pd/ WO_3 .

Uzyskane wyniki mogą stanowić podstawę dla projektowania układów zawierających wodór, który jest zdolny do działania w reakcjach katalitycznych. Właściwości strukturalne tlenku wolframu stanowią istotny parametr warunkujący reaktywność wodoru.

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

(prof. Wiesław Łasocha, dr Dariusz Mucha, mgr Barbara Bożek, mgr Adrianna Sławińska)

Celem badań było uzyskanie nowych połączeń typu perokso kompleksów oraz polioksozwiązków metali: Mo(VI), W(VI) oraz V(V) z aminami, oraz wybranymi kationami nieorganicznymi. Związki te były przedmiotem badań strukturalnych, fizykochemicznych i katalitycznych.

Do badań zaplanowanych na rok 2017 należało w szczególności:

- Zbadanie układu fazowego utworzonego przez: tlenek molibdenu MoO_3 , lub kwas molibdenowy – woda – kationy kobaltu(II), niklu(II), miedzi(II).
- Zbadanie możliwości syntezy molibdenianów cyny(II) i miedzi(I).
- Synteza nowych molibdenianów pochodnych alkiloanilin.

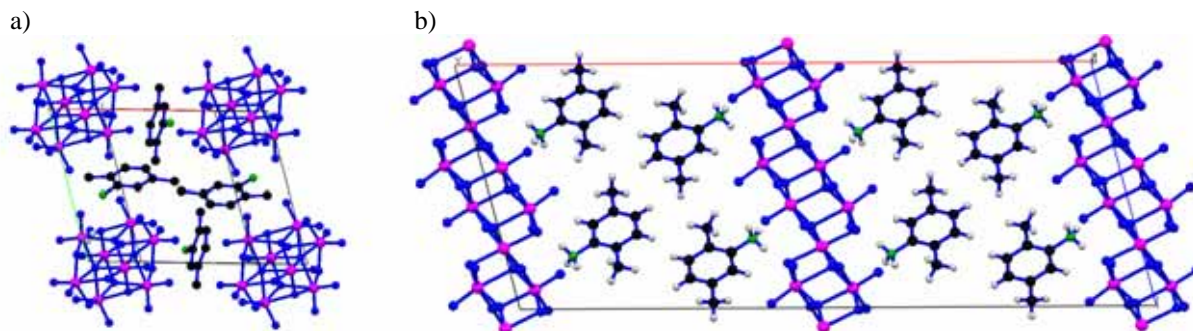
Wśród uzyskanych wyników warto wymienić:

Ad a) Uzyskanie szeregu mieszanych związków typu $(\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x})\text{Mo}_3\text{O}_{10}\cdot n\text{H}_2\text{O}$. Opracowano nową metodę syntezy mieszanych trimolibdenianów kobaltowo-cynkowych z użyciem mikrofal. Zbadano ich jednorodność chemiczną i morfologię przy użyciu technik SEM oraz własności katalityczne.

Ad b) Podjęto próby syntezy molibdenianów Sn(II) i Sn(IV) metodą podwójnej wymiany z użyciem molibdenianów sodu i srebra. Jony Sn(II) z wodnych roztworów molibdenianu sodu natychmiast wytrącały błękity molibdenowe, molibdenian srebra ulegał reakcji wymiany z wytworzeniem AgCl oraz heksagonalnego MoO_3 . Chlorek cyny(IV) ulegał reakcji wymiany z molibdenianem sodu z wytworzeniem NaCl , innych produktów stałych nie otrzymano w postaci krystalicznej. Nie zaobserwowano tworzenia błękitów molibdenowych podczas reakcji wymiany chlorku miedzi(I) z Na_2MoO_4 . Otrzymane produkty krystaliczne są na etapie dogłębnych analiz, są to jak dotąd fazy nieopisane w dostępnych bazach danych (PDF, ICSD).

Ad c) Prowadzone były prace nad opracowaniem ogólnych prawidłowości wiążących wyniki syntez i badania strukturalne metylopo pochodnych aniliny. Zbadaliśmy jak dotąd mono-, di- i 2,4,6-trimetylo pochodne aniliny, dla których opracowano wykresy fazowe zawierające: typ struktury w funkcji położenia grup metylowych i wyselekcjonowanych 5 standartowych warunków syntez. Przeprowadzono też badania różnych warunków reakcji celem zbadania możliwości syntez nowych molibdenianów 2-n-propyloaniliny. Uzyskano 3 monofazowe osady polikrystaliczne, dane analityczne wskazują, iż otrzymano nowe penta-, okta i deka- molibdeniany 2-n-propyloaniliny.

Dla części uzyskanych preparatów przeprowadzono badania katalityczne, były to testy utleniania cyklooktanu przy użyciu tlenu z powietrza (badania w IKiFP PAN) oraz utlenianie cyklooktenu przy użyciu tbhp -tertbutyhydroperoxide (wykonywane na Uniwersytecie w Aveiro, Portugalia).



Rysunek 1. Przykłady nowych polimolibdenianów 2,5-dimetyloaniliny. a) komórka elementarna -oktamolibdenianu, b) rzut struktury pentamolibdenianu. Kolory: czerwony, zielony, czarny, szary i niebieski oznaczają molibden, azot, węgiel, wodór i tlen.

3. Katalityczne układy tlenkowe do otrzymywania produktów o wysokiej wartości dodanej - komponentów paliw i tworzyw sztucznych

Optymalizacja właściwości redoksowych bi-funkcyjnych układów miedziowych osadzonych na ZrO₂ - katalizatorów reakcji uwodornienia CO₂ i utleniania metanolu, prowadzących do otrzymywania komponentów paliw i tworzyw sztucznych

(dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, dr Michał Śliwa, dr inż. Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, dr Łukasz Kuterasiński, mgr Wojciech Rojek, mgr Jerzy Podobiński)

Celem zadania badawczego była optymalizacja bi-funkcyjnych katalizatorów miedziowych osadzonych na nośnikach tlenkowych o zmiennej kwasowości i redukowalności do reakcji uwodornienia dwutlenku węgla do metanolu i eteru dimetylowego.

W pierwszym kroku, jako referencyjny wybrano układ CuO/ZrO₂ otrzymany metodą współstrącania z azotanów miedzi i cyrkonu, przy użyciu NaOH jako czynnika strącającego. Jego aktywność została potwierdzona badaniami wstępnymi w reakcji uwodornienia CO₂ do metanolu i DME w zakresie temperatur 200-350°C, prowadzonej w wysokociśnieniowym reaktorze przepływowym ze stałym złożem katalizatora sprzężonym on-line z chromatografem gazowym wyposażonym w detektory TCD i FID dla analizy reagentów. Następnie zbadano wpływ wybranych promotorów (Ag, Mn, Ru i Ce, zawartość promotorów 3% wag) na właściwości fizykochemiczne i katalityczne otrzymanych próbek. Otrzymane preparaty scharakteryzowano przy użyciu następujących metod: XRD, niskotemperaturowej sorpcji N₂, H₂-TPR, NH₃-TPD oraz mikroskopii SEM. Tabela 1 zawiera podstawowe parametry badanych próbek. Aktywność domieszkowanych preparatów mierzono zarówno w reakcji uwodorniania dwutlenku węgla wg opisanej powyżej procedury, jak i utleniania metanolu (w temperaturze 300°C, pod ciśnieniem atmosferycznym, prowadzonej w reaktorze przepływowym ze stałym złożem katalizatora sprzężonym on-line z chromatografem gazowym wyposażonym w detektory TCD i FID dla analizy reagentów), uważanej za reakcję – sondę właściwości redoksowych oraz kwasowych katalizatorów tlenkowych.

Opisane powyżej badania wpisują się w nurt prac nad zagospodarowaniem dwutlenku węgla, będącego jednym z głównych gazów cieplarnianych. W związku z ciągłym rozwojem przemysłu oraz oparciem energetyki w wielu krajach na węglu, ilość emitowanego CO₂ do atmosfery stale rośnie. Z drugiej zaś strony, bezustanny wzrost zapotrzebowania na paliwa i energię zmusza do poszukiwań ich alternatywnych źródeł oraz opracowywania nowych, efektywniejszych technologii ich pozyskiwania ze źródeł konwencjonalnych. Stąd w ostatnich latach wiele prac badawczych koncentruje się na zagospodarowaniu dwutlenku węgla, który jest atrakcyjnym substratem, będącym źródłem węgla, bezpiecznym i ekonomicznym. W wyniku jego przemian można otrzymać wiele użytecznych związków organicznych, które stosowane mogą być jako paliwa lub ich dodatki, między innymi metan, metanol, wyższe alkohole czy eter dimetylowy (DME).

Tabela 1. Podstawowe parametry fizykochemiczne katalizatorów CuO/ZrO₂-X, gdzie X = Ag, Mn, Ru, Ce

Preparat	S _{SA} [m ² /g]	V _{porów} [cm ³ /g]	φ _{porów} [Å]
CuO/ZrO ₂	139	0,16	79,6
CuO/ZrO ₂ -Ag	193	0,15	34,5
CuO/ZrO ₂ -Mn	150	0,51	16,5
CuO/ZrO ₂ -Ru	151	0,12	34,4
CuO/ZrO ₂ -Ce	185	0,14	34,6

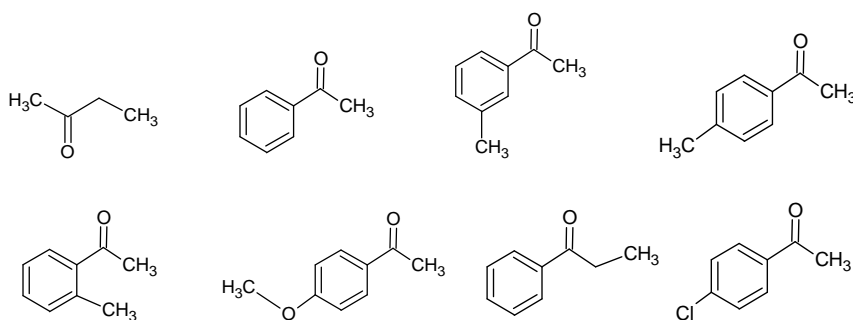
4. Uwodornienie ketonów w obecności katalizatorów metalicznych na nośnikach mikro- i mezoporowatych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Dorota Duraczyńska, dr Alicja Michalik-Zym, mgr Bogna D. Napruszewska, dr Robert P. Socha, dr Małgorzata Zimowska)

Celem pracy była synteza, charakterystyka oraz zastosowanie katalizatorów rutenowych na nośnikach w heterogenicznym uwodornieniu wybranych ketonów. W charakterze nośników wykorzystano dwa typy materiałów: mezoporowatą krzemionkę typu SBA-15 oraz żywicę metakrylanowo-styrenową zawierającą 1,2-etylenodiaminę (tzw. FCN).

W przypadku nośnika krzemionkowego ruten osadzano metodą impregnacji na mokro. Otrzymane katalizatory (1 wt.% Ru/SBA-15 oraz 2 wt.% Ru/SBA-15), scharakteryzowano za pomocą XRD, XPS, SEM, HRTEM oraz wyznaczono ich własności teksturalne. Właściwości katalityczne badano w reakcji uwodornienia 2-butanonu do 2-butanolu. Produkt tej reakcji jest stosowany w praktyce przemysłowej jako rozpuszczalnik w procesach chemicznych oraz włókiennictwie. Badaną reakcję prowadzono w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury (1 bar H_2 , temperatura pokojowa); jako rozpuszczalnika użyto wody. Oba katalizatory wykazały wysoką aktywność katalityczną i już po 30 minutach procesu katalizator 1 wt.% Ru/SBA-15 osiągnął 30%, a 2 wt.% Ru/SBA-15 51% konwersji. W tych samych warunkach katalizator odniesienia zawierający 2% wag. Ru osadzonego na wysokopowierzchniowej krzemionce (2 wt.% Ru/SiO₂) osiągnął 30% konwersji po 30 minutach testu. Uzyskane materiały należą do nielicznej grupy katalizatorów wykazujących aktywność katalityczną w reakcji uwodornienia 2-butanonu do 2-butanolu w tak łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury.

Katalizator rutenowy na nośniku polimerowym, 2 wt.% Ru/FCN, otrzymano za pomocą metody polegającej na dodaniu odpowiedniej ilości wodnego roztworu $RuCl_3 \cdot H_2O$ do zawiesiny zawierającej spęczniały polimer w THF, a następnie redukcji jonów Ru^{3+} do Ru metalicznego przy użyciu $NaBH_4$. Katalizator został scharakteryzowany z wykorzystaniem metod: XRD, XPS, FTIR, SEM, EDS oraz HRTEM. Właściwości katalityczne badano w reakcjach uwodornienia wybranych ketonów: ketonu etyloowo-metylowego, acetofenonu, metyloacetofenonu (grupa CH_3 w pozycji orto, meta i para), p-chloroacetofenonu, p-metoksyacetofenonu oraz ketonu etyloowo-fenylowego (Schemat 1).



Schemat 1. Struktury badanych ketonów

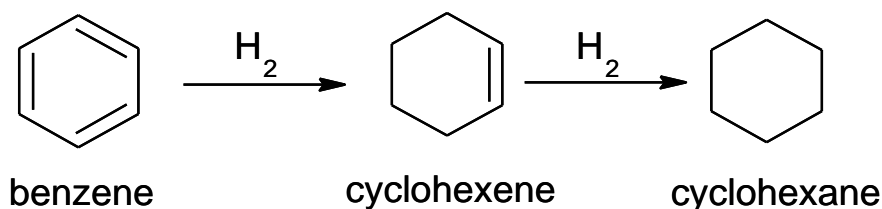
Reakcje uwodornienia wybranych ketonów prowadzono w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury (40°C, ciśnienie $H_2 = 1$ bar). Jako rozpuszczalnika użyto mieszaniny IO/ H_2O (1:1) (IO = izooktan); czas reakcji to 4h. Badany katalizator wykazał aktywność w katalitycznym uwodornieniu wybranych ketonów. We wszystkich reakcjach obserwowano uwodornienie grupy $C=O$ do grupy $C-OH$. W przypadku acetofenonu, oprócz alkoholu 2-rzędowego miało miejsce uwodornienie grupy fenylowej.

5. Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Jan Połtowicz, dr Katarzyna Pamin, dr inż. Alicja Michalik-Zym, dr Małgorzata Zimowska)

Reakcja uwodornienia benzenu jest reakcją następczą przebiegającą do cykloheksanu poprzez cykloheksen (Rysunek 1). Trudność tego procesu polega na takim doborze warunków reakcji i katalizatorów, aby w reakcji uwodornienia benzenu powstawał cykloheksen i nie zachodziło dalsze jego uwodornianie do cykloheksanu.

Nasze dotychczasowe badania dotyczące katalizatorów rutenowych osadzonych na różnych nośnikach sugerowały, że istotnym czynnikiem wpływającym na przebieg reakcji jest stopień dyspersji rutenu. W patentach firmy Asahi Chemical Ind., która uzyskuje wysokie wydajności do cykloheksenu w omawianej reakcji, jako katalizator stosowana jest nie naniesiona czerń rutenowa. Ponieważ w otwartej literaturze brak jest opracowań, które pokazywałyby zależność wydajności do cykloheksenu od wielkości cząstek czerni rutenowej, celem obecnych badań była synteza preparatów czerni rutenowej o zróżnicowanej wielkości cząstek metalu, oraz określenie ich aktywności i selektywności w reakcji selektywnego uwodornienia benzenu do cykloheksenu.



Rysunek 1. Schemat reakcji uwodornienia benzenu

Założony cel badań postanowiono osiągnąć poprzez zmianę warunków syntezy czerni rutenowej, takich jak: rodzaj zasady używanej do strącania osadu wodorotlenku rutenu, sposób dodawania odczynnika strącającego do mieszaniny reakcyjnej, szybkość mieszania, czy temperatura reakcji. W drugim etapie syntezy, polegającym na redukcji otrzymanego wcześniej prekursora do czerni rutenowej, zmieniana była szybkość obrotów mieszadła w reaktorze.

Otrzymana seria czerni rutenowych została zbadana metodą dyfraktometrii rentgenowskiej w celu określenia wielkości krystalitów rutenu, których rozmiar mieścił się w zakresie 5-15 nm. Zsyntezowane katalizatory zostały zastosowane w reakcji uwodornienia benzenu w reaktorze tytanowym o objętości 1 litra z mieszaniem 1500 obr/min, pod ciśnieniem 50 atm wodoru i w temperaturze 150°C. Przeprowadzone badania katalityczne pokazały, że wydajność do cykloheksenu rosła wraz ze zmniejszeniem wielkości cząstek rutenu.

Uzyskane wyniki stanowią punkt wyjścia do dalszych badań nad kontrolą dyspersji fazy rutenowej w katalizatorach do uwodornienia benzenu do cykloheksenu.

6. Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu nadtlaniem wodoru na naturalnych minerałach zasadowych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr inż. Robert Karcz, mgr inż. Bogna D. Napruszewska, dr Joanna Kryściak-Czerwenka, dr Joanna Olszówka, dr Elżbieta Bielańska)

ϵ -Kaprolakton jest ważnym substratem do produkcji polimerów biokompatybilnych i biodegradowalnych – polikaprolaktonu i jego pochodnych. Związek ten obecnie produkowany jest na skalę przemysłową przez utlenianie typu Baeyera-Villigera cykloheksanonu przy pomocy organicznych nadkwasów, co stanowi znaczne obciążenie dla środowiska naturalnego, ze względu na wybuchową naturę utleniaczy i dużą ilość kwasowych produktów ubocznych.

Alternatywnym, bardziej „zielonym” sposobem, jest zastosowanie w roli czynnika utleniającego nadtlenu wodoru w obecności katalizatora. Wykazano, że dobrymi katalizatorami tej reakcji są materiały o charakterze zasadowym, np. syntetyczne hydrotalkity. Z naszych doświadczeń wynika, że również naturalne minerały o właściwościach zasadowych mogą być aktywne w utlenianiu cykloheksanonu. Z tego względu postanowiono przebadać właściwości katalityczne serii różnych minerałów zasadowych uzyskanych ze złóż krajowych, oraz ocenić możliwość poprawy ich właściwości katalitycznych przez mielenie w młynie planetarnym.

Badaniom poddano 8 próbek, w tym 2 preparaty dolomitowe, 3 magnezytowe, 2 chlorytowe i 1 serpentynit. Wśród badanych materiałów w stanie naturalnym najwyższą aktywność katalityczną wykazał dolomit ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$) pobrany ze złóż w Jeleniej Górze, przy użyciu którego uzyskano 14% wydajności do ϵ -kaprolaktonu. Wybrane minerały zostały poddane mieleniu w młynie planetarnym, kolejno przez 10 i 30 min. Stwierdzono, że krótki czas mielenia próbki korzystnie wpływa na aktywność katalityczną (w przypadku dolomitu z Jeleniej Góry uzyskano 23% wydajności do ϵ -kaprolaktonu), natomiast wydłużenie czasu mielenia nie przynosi spodziewanej poprawy. Aby wyjaśnić związek pomiędzy właściwościami badanych próbek a ich właściwościami katalitycznymi przeprowadzono szereg badań fizykochemicznych (XRF, XRD, SEM, rozmiar cząstek, BET, pomiar kąta zwilżania, metody spektroskopowe). Stwierdzono, że wraz ze wzrostem czasu mielenia maleje rozmiar krystalitów próbki oraz jej stabilność termiczna. Pomiar wielkości cząstek wykazał, że krótkie czasy mielenia sprzyjały rozdrobnieniu materiału i zmniejszeniu rozmiaru cząstek. W przypadku dłuższego mielenia (kolejne 30 min) w młynie zachodzi proces aglomeracji cząstek prowadzący do wzrostu ich rozmiaru, co jest niekorzystne dla katalizy i limituje możliwość stosowania mielenia jako sposobu aktywacji katalizatora mineralnego. Stwierdzono, że obecność żelaza w składzie chemicznym minerału gwałtownie pogarsza jego właściwości katalityczne w badanej reakcji.

Przeprowadzone badania wykazały, że zasadowe minerały, nie zawierające domieszki żelaza, mogą być z powodzeniem zastosowane jako tanie i ekologiczne katalizatory heterogenicznej reakcji utleniania w fazie ciekłej. Aktywność katalityczna tego typu materiałów może być w znacznym stopniu zwiększona poprzez mielenie, przy czym konieczna jest optymalizacja parametrów obróbki mechanicznej, gdyż proces prowadzony zbyt długo prowadzi do ponownej agregacji ziaren, skutkującej spadkiem aktywności katalitycznej materiału.

7. Elektrochemiczne właściwości złota, jako materiału na konektory w ogniwach paliwowych z elektrolitem ze stałego tlenku

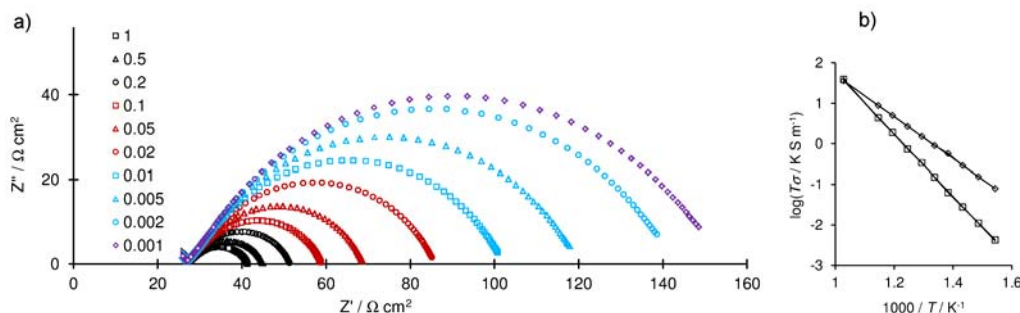
(dr hab. Michał Mosiałek, dr Robert P. Socha, prof. Paweł Nowak, dr inż. Grzegorz Mordarski)

Jednym z nierozwiązanych problemów przy konstrukcji wysokotemperaturowych stałotlenkowych ogniw paliwowych jest dobór właściwego materiału do wykonania konektora łączącego katodę z zewnętrznym układem elektrycznym. Najczęściej stosowana stal żaroodporna uwalnia w czasie pracy ogniwa lotne związki chromu powodujące jego degradację. Właściwym materiałem mogłoby być złoto, które wykazuje wysokie przewodnictwo elektronowe, jest plastyczne i odporne na korozję. Celem badań było określenie właściwości elektrochemicznych i stabilności tego materiału w warunkach panujących podczas pracy ogniwa a w szczególności jego podatności na migrację w polu elektrycznym.

Badano oddziaływanie złota z najczęściej stosowanymi obecnie elektrolitami oraz z tlenem, który stanowi główny składnik atmosfery w przestrzeni katodowej ogniwa. Używano następujących elektrolitów: $\text{Ba}_{0,95}\text{Ca}_{0,05}\text{Ce}_{0,9}\text{Y}_{0,1}\text{O}_3$ (BCCY), $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{O}_{2-0,5x}$ (YSZ), $\text{Ce}_{0,8}\text{Sm}_{0,2}\text{O}_{1,9}$ (CSO), $\text{Ce}_{0,8}\text{Gd}_{0,2}\text{O}_{1,9}$ (CGO). Własności elektrody złotej były badane w dwu- i trójelektrodowym układzie pomiarowym. Stosowano zarówno pseudopunktowe elektrody złote jak również elektrody porowate. Badania elektrochemiczne były prowadzone metodami chronoamperometrii, woltamperometrii cyklicznej i elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej.

Badania chronoamperometryczne pokazały, że złoto polaryzowane ujemnym potencjałem w kontakcie z YSZ, CGO, CSO lub BCCY ulega w pewnym stopniu migracji, co objawia się wzrostem prądu w początkowym okresie i pojawianiem się na powierzchni elektrolitu wokół elektrody depozytu złota. Po początkowym okresie wzrostu (~4 godziny) prąd ulega stabilizacji i pozostaje stabilny w ciągu 20 godzin. Świadczy to o zahamowaniu tworzenia się depozytu złota na powierzchni elektrolitu w wyniku zmniejszenia się powierzchniowej gęstości prądowej spowodowanego pojawieniem się depozytu. Zachowanie takie obserwowano jedynie przy potencjałach polaryzacji bardziej ujemnych niż około $-0,3$ V, przy niższych potencjałach tworzenia się depozytu nie obserwowano a prąd był stabilny przez cały czas trwania eksperymentu.

Informacje na temat oddziaływania złota z tlenem uzyskano na podstawie analizy woltamperogramów oraz widm impedancyjnych rejestrowanych na elektrodach złotych w różnych temperaturach i parcjalnych ciśnieniach tlenu. Jak stwierdzono w warunkach, jakie panują w przestrzeni katodowej ogniwa złoto nie ulega utlenieniu, natomiast reakcja elektroredukcji tlenu zachodzi ze znaczną szybkością, co jest bardzo korzystne z punktu widzenia zastosowania złota jako materiału na konektory. Na podstawie analizy zależności oporności polaryzacyjnej (R_p) elektrody od stężenia parcjalnego tlenu stwierdzono, że reakcja ta zachodzi w obszarze kontroli mieszanej, dyfuzyjno-aktywacyjnej. Z analizy zależności oporności polaryzacyjnej od temperatury wyznaczono energię aktywacji reakcji, która wynosi $1,52$ eV w całym badanym zakresie temperatur.



Rysunek 1. Przykładowe widma impedancyjne elektrody Au w kontakcie z elektrolitem CSO w układzie Nyquista w 700 °C, liczby w legendzie oznaczają P_{O_2} (a), zależność oporu od T : R_p – kwadraty, opór elektrolitu – romby (b)

8. Procesy enzymatyczne – badania podstawowe i aplikacyjne

Wybrane enzymy oraz fotochemiczne uwalnianie CO - badania obliczeniowe

(prof. Tomasz Borowski, dr hab. Maciej Szaleniec, prof. IKiFP PAN, dr Maciej Guzik, dr Agnieszka Wojtkiewicz, dr inż. Mateusz Tataruch, dr Sangita Kachhap, mgr Zuzanna Wojdyla)

Celem badań podstawowych prowadzonych metodami obliczeniowymi jest uzyskanie wglądu w mechanizmy reakcji enzymatycznych oraz struktury wybranych białek i ich kompleksów ze związkami niskocząsteczkowymi.

Jednym z badanych enzymów jest **Lcar** (N-carbamoyl-L-amino acid amidohydrolase) – enzym wykorzystywany przemysłowo do kinetycznego rozdzielania mieszanin racemicznych N-karbamoylo-L-aminokwasów. Badany enzym jest funkcjonalnym homodimerem wiążącym jony Co^{2+} w swoim miejscu aktywnym, lecz pomimo tego, iż znana jest jego struktura krystaliczna, wciąż nie wiadomo czy w natywnej formie białka w miejscu aktywnym wiąże się jeden czy dwa jony Co^{2+} , czy w enzymie tym występuje kooperacja między monomerami oraz jak wiąże się substrat do białka i jaki jest szczegółowy mechanizm reakcji katalitycznej. Przeprowadzono symulacje klasycznej dynamiki molekularnej (MD) dla homodimeru **Lcar** w dwóch wariantach – z jednym i dwoma jonami kobaltu(II) w miejscu aktywnym, o długości 80 ns każda, z wykorzystaniem modelu niewiążącego LJ 12-6-4 dla oddziaływań metal-otoczenie. Analiza uzyskanych trajektorii wykazała, że w obu przypadkach dochodzi do trwałej zmiany składu i geometrii pierwszej strefy koordynacyjnej jonów Co^{2+} , co sugeruje, że model 12-6-4 LJ nie jest w stanie wiarygodnie odtworzyć geometrii miejsca aktywnego tego enzymu. W związku z tym, wyznaczono parametry dla modelu wiążącego (explicite uwzględniającego wiązania Co-ligandy) i obecnie symulacje MD prowadzone są z jego użyciem.

Kolejnym badanym enzymem jest **DapB** (Dihydrodipicolinate reductase) – enzym bakteryjny katalizujący zależną od NAD(P)H redukcję dihydrodipikolinianu do tetrahydrodipikolinianu. Struktura krystaliczna **DapB** w kompleksie z inhibitorem była punktem wyjścia do przeprowadzenia szeregu symulacji MD (o długości > 55 ns, każda) dla różnych możliwych geometrii startowych kompleksu enzym-substraty oraz dwóch różnych stanów jonizacji kluczowego aminokwasu występującego w miejscu aktywnym. Obliczenia energii wiązania ligandów wykonane metodą MMPBSA pozwoliły na wyłonienie najbardziej prawdopodobnych struktur kompleksów enzym-substraty, które z kolei posłużyły do przygotowania modelu wykorzystywanego obecnie w obliczeniach kwantowo-chemicznych dla mechanizmu reakcji.

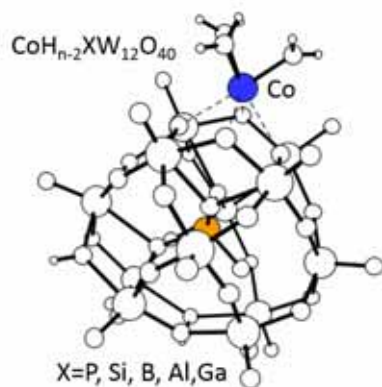
Kolejnym badanym białkiem jest **Pru p 3** (Nonspecific lipid transfer protein) – główny alergen brzoskwini. Białko to wiąże niespecyficznie kwasy tłuszczowe, przy czym wiązanie kwasu oleinowego powoduje wzrost siły wiązania przeciwciał IgE pacjentów uczulonych na ten owoc. Wykonano symulacje klasycznej dynamiki molekularnej (150 ns każda) dla formy apo oraz w kompleksie z kwasem oleinowym lub jego anionem. Analiza oddziaływań białko-ligand pozwoliła zidentyfikować aminokwasy zaangażowane w wiązanie oraz rejony białka najbardziej zmieniające swoją konformację w odpowiedzi na tworzenie kompleksu.

Dwa metaloenzymy badane uprzednio w naszej grupie (**QDO** i **Ni-ARD**) katalizują utleniające rozcięcie swoich substratów z uwolnieniem tlenu węgla(II). Interesującym i celowym wydawało się więc przebadanie mechanizmu fotochemicznej reakcji uwalniania CO dla syntetycznego związku należącego do tej samej grupy co substraty wyżej wymienionych enzymów. Badania obliczeniowe obejmowały wyznaczenie punktów stacjonarnych oraz punktów przecięcia powierzchni energii potencjalnej dla stanu podstawowego oraz kilku nisko leżących stanów wzbudzonych (S1, T1, T2). Uzyskane wyniki pozwoliły na zaproponowanie prawdopodobnego mechanizmu fotoaktywacji i reakcji badanego związku z tlenem cząsteczkowym.

9. Eksperymentalny i teoretyczny opis heteropolizwiązków, modyfikowanych w pozycji jonu centralnego i kationu kompensującego

(prof. Małgorzata Witko, dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, prof. IkiFP PAN, dr hab. Anna Micek-Ilnicka, dr Urszula Filek, dr Robert Gryboś)

Celem badań eksperymentalnych i teoretycznych był opis struktury elektronowej oraz właściwości fizykochemicznych i katalitycznych soli kobaltowych heteropolizwiązków, o strukturze anionu Keggina, z wybranymi jonami centralnymi (P, Si, B, Al, Ga) i wolframu w pozycjach atomów addenda.



Kontynuując badania układów heteropolizwiązków z różnymi jonami centralnymi, wykonano syntezę soli kobaltowych tych układów, o wzorze ogólnym $\text{CoH}_{(n-2)}\text{XW}_{12}\text{O}_{40}$ ($n=3, 4, 5$; $\text{X} = \text{P, Si, B, Al}$), w których na jeden anion Keggina wprowadzono jeden kation Co^{2+} : $\text{CoHPW}_{12}\text{O}_{40}$ (CoHPW), $\text{CoH}_2\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}$ (CoHSiW), $\text{CoH}_3\text{AlW}_{12}\text{O}_{40}$ (CoHAlW), $\text{CoH}_3\text{BW}_{12}\text{O}_{40}$ (CoHBW). Dla układów niekomercyjnych (HAlW, HBW) opracowano nową metodę syntezy soli kobaltowych z azotanu kobaltu. Przeprowadzono charakterystykę fizykochemiczną nowych związków. Analiza derywatograficzna wykazała ich wysoką trwałość termiczną, porównywalną z odpowiednimi kwasami.

Temperatury rozkładu wyniosły przykładowo dla CoHPW-578°C (HPW-618°C), CoHSiW-600°C (HSiW-539°C) i CoHAlW-489°C (HAlW-474°C). W widmach IR występują charakterystyczne dla anionu Keggina pasma, a ich szczegółowa analiza wskazuje na silne oddziaływanie wprowadzonego kationu Co^{2+} z atomami anionu [zaobserwowano np. przesunięcie drgań W-O_b-W (901 cm⁻¹) w soli CoHPW, w porównaniu do drgań w HPW (883 cm⁻¹) czy przesunięcie drgań W-O_c-W (772 cm⁻¹), w porównaniu do układu HSiW (788 cm⁻¹)]. Właściwości katalityczne układów przetestowano w reakcji odwadniania (w przepływie helu) i utlenienia (w powietrzu) alkoholu etylowego. Naważki preparatów wynosiły 0,1 g, prędkość przepływu reagenta przez reaktor - 35 ml/min, WHSV- 2,0 h⁻¹. Produktami konwersji alkoholu były: etylen, dietylowy eter i aldehyd octowy, a podczas utleniania alkoholu zarejestrowano dodatkowo śladowe ilości octanu etylu. Dane eksperymentalne pokazują, że wprowadzenie jonu Co pogarsza właściwości kwasowe badanych układów, zwiększa natomiast ich właściwości redoksowe, które zmieniają się w szeregu: CoHPW>CoHSiW>CoHAlW~CoHBW.

Równoległe z badaniami eksperymentalnymi wykonano obliczenia teoretyczne, stosując zarówno model klasterowy (pojedynczy anion Keggina z protonami/jonami kobaltu), jak i obliczenia periodyczne. Wyznaczona energetyka orbitali granicznych i szerokość przerwy energetycznej, pozwoliły skorelować te parametry teoretyczne z aktywnością katalityczną w reakcjach utlenienia. Właściwości kwasowe modelowano poprzez obliczenia energii wiązania H⁺. Obliczenia pozwoliły określić jak na energię wiązania protonów przez anion Keggina (będąca miarą mocy centrów kwasowych) wpływa: a) charakter chemiczny jonu centralnego (ładunek wewnętrznego tetraedru), b) obecność kobaltu, jako kationu kompensującego, c) stopień uwodnienia jonów kobaltu. Rozpatrywano zarówno protony bezpośrednio skoordynowane z anionem Keggina jak i pochodzące z dysocjacji wody.

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

10. Nowe materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe

(prof. Bogdan Sulikowski, dr Mariusz Gackowski)

Zeolity syntetyczne są ważnymi katalizatorami stosowanymi w przemyśle chemicznym i procesach rafineryjnych, dlatego od kilku dekad są obiektem intensywnych badań na całym świecie. Jedną z ich kluczowych właściwości jest fakt usytuowania centrów aktywnych Brønsteda i Lewisa wewnątrz mikroporów zeolitowych. Podczas konwersji dużych cząsteczek często obserwuje się występowanie oporów dyfuzyjnych. Takie opory przepływu masy mogą być przyczyną szybkiej dezaktywacji katalizatora. Stąd też w celu polepszenia właściwości katalitycznych zeolitów, można zastosować ich hierarchiczne formy, otrzymywane zwykle z użyciem roztworów alkalicznych.

Jakkolwiek proces desilikacji badano dla rozmaitych zeolitów, takich jak mordenit, ferieryt, Beta, do chwili obecnej największą uwagę poświęcono zeolitowi ZSM-5. Jednakże, spośród ponad dwustu znanych obecnie struktur zeolitowych, materiałem o największym znaczeniu pozostaje niewątpliwie zeolit typu Y o strukturze fojazytu (FAU). Jest on produkowany w dużej skali przemysłowej i stosowany do produkcji katalizatorów krakingowych, a także wielu innych katalizatorów specjalnych. Desilikacja standardowego zeolitu Y jest daleko trudniejszym zadaniem niż desilikacja innych struktur, ze względu na wysoką zawartość ugrupowań AlO_4^- osłaniających skutecznie sieć glinokrzemianową przed atakiem grup OH^- . Traktowanie standardowego zeolitu Y ($\text{Si}/\text{Al}=2,5$) roztworami zasad prowadzi przeważnie do jego amorfizacji, podobnie jak próby bezpośredniego dealuminiowania za pomocą roztworów kwasów.

Wykonano szczegółowe studium desilikacji zeolitu typu Y poddanego uprzednio dealuminiowaniu. Zeolit wyjściowy o podwyższonym stosunku Si/Al traktowano roztworami zasad (NH_3 aqua, NaOH, TBAOH, mieszaniny NaOH/TBAOH). Właściwości kwasowe zbadano metodą FT IR. W szczególności określono stężenia centrów kwasowych Brønsteda i Lewisa, ich moc oraz heterogeniczność. Równocześnie zbadano status glinu i krzemu w próbkach, wykonując równoległe widma metodą MAS NMR. Dodatek jonów tetrabutylamoniumowych do NaOH okazał się kluczowy podczas desilikacji zeolitu Y.

Otrzymane preparaty testowano w procesie izomeryzacji α -pinenu w fazie ciekłej, w celu otrzymania kamfenu i limonenu. Te dwa węglowodory stanowią cenny surowiec w przemyśle chemicznym i spożywczym. Wykonane uprzednio przez nas badania wykazały przydatność do tego procesu kilku zeolitów różniących się strukturą, składem chemicznym i architekturą porów. Uzyskanie wysokoaktywnego i selektywnego katalizatora na podstawie zeolitu Y wymaga jednakże szczegółowego zrozumienia procesów, zachodzących na poziomie molekularnym podczas jego modyfikacji metodą desilikacji.

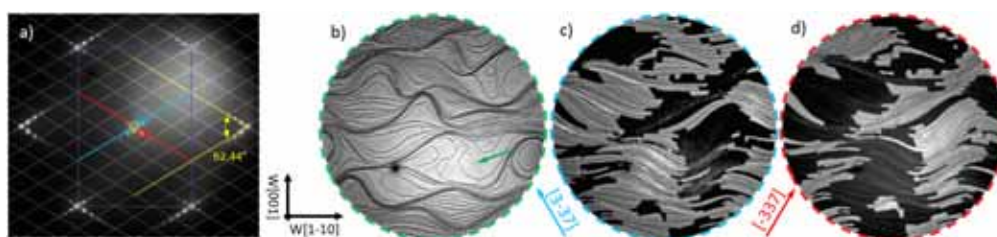
W oparciu o ilościową analizę widm NMR ustalono skład sieci glinokrzemianowej oraz dystrybucję glinu pomiędzy pozycje *sieciowe* i *pozasieciowe* preparatów zeolitowych. Analiza danych katalitycznych dotycząca zarówno badanego zeolitu, jak również glinokrzemianów o innej budowie, pozwoli na uzyskanie ogólnych zależności pomiędzy strukturą zeolitu, składem sieci glinokrzemianowej (Si/Al), dystrybucją glinu, obecnością centrów aktywnych, a także obecnością mikro- i mezoporów w preparatach, a przebiegiem procesu izomeryzacji α -pinenu.

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

Właściwości magnetyczne układu CoO/Fe(001): exchange-bias w funkcji grubości warstw i temperatury

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

Wysokotemperaturowe porządkowanie się tlenu zaadsorbowanego na powierzchni W(110) było badane przy użyciu dyfrakcji elektronów niskoenergetycznych (LEED) i mikroskopii elektronowej z wykorzystaniem niskoenergetycznych elektronów (LEEM). Korzystając z tych dwóch technik, zidentyfikowano w przestrzeni odwrotnej i rzeczywistej dwie z trzech wysokotemperaturowych faz tlenku wolframu opisanych w literaturze. Porównując obrazy LEEM w jasnym i ciemnym polu opisano właściwości strukturalne różnych faz. W szczególności określona została korelacja między stopniami atomowymi podłoża a występowaniem określonych domen strukturalnych. Stwierdzono występowanie indukowanej temperaturą strukturalnej transformacji pomiędzy zidentyfikowanymi fazami. Pokazano, że w określonych warunkach ciśnienia i temperatury transformacja ta może zachodzić odwracalnie w obu kierunkach i że można ją zatrzymać na dowolnym etapie.



Rysunek 1. Jedna ze zidentyfikowanych faz tlenkowych: (a) obraz LEED z zaznaczoną powierzchniową komórką elementarną W(110) (fioletowy prostokąt) i plamkami do obrazowania w jasnym (b) i ciemnym polu (c,d).

Zbadano właściwości magnetyczne epitaksjalnych klinowych dwuwarstw CoO/Fe na MgO(001). Zebrano obszerny zbiór pętli histerezy w funkcji temperatury w szerokim zakresie grubości CoO i Fe przy użyciu obrazowania z wykorzystaniem efektu Kerr'a. Szczególną uwagę poświęcono temperaturom bliskim temperatury Néela CoO oraz ultra cienkim warstwom, tak aby można było zbadać mechanizm powstawania efektu typu „exchange bias” (EB). Określono charakterystyczną grubość CoO (30-40 Å), powyżej której warstwy CoO zachowywały się tak jak materiał lity. Efekt EB obserwowano jednak znacznie poniżej tej grubości, nawet dla warstw o grubości 12 Å, dla niskich temperatur. Pomiary XPS pokazały, że ważna dla zjawiska EB jest interfejsowa niestechiometryczna warstwa FeO_x o zmiennej stechiometrii oraz że skład warstwy CoO jest niezależny od jej grubości.

Wykonano obliczenia ab initio adsorpcji atomowego tlenu i magnezu na powierzchni Fe(001). Rozważono dwa scenariusze adsorpcji: (i) atomy Mg były adsorbowane na powierzchni Fe(001) z preadsorbowanymi atomami O, (ii) metaliczny Mg preadsorbowany na Fe(001) był wystawiony na działanie tlenu. Zarówno dla atomów O, jak i Mg najkorzystniejszymi energetycznie miejscami adsorpcji były czterokrotnie skoordynowane luki na czystej powierzchni Fe(001). W wyniku obu procesów na powierzchni Fe(001) powstawała warstwa MgO z ostrym interfejsem MgO/Fe. Pokazano, że depozycja atomów Mg na O/Fe(001) powoduje wyciągnięcie adatomów O z powierzchni Fe. Zbadano właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne w funkcji pokrycia O i Mg. Pokazano, że pełna monowarstwa MgO wpływa na właściwości powierzchni Fe znacznie słabiej niż warstwa niekompletna.

Zakończono z sukcesem pierwszy etap uruchamiania linii eksperymentalnej PEEM/XAS w narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego „Solaris”. Linia jest gotowa na przyjęcie użytkowników w ramach Konsorcjum CERIC-ERIC.

12. Badania wpływu parametrów mikroskopowych i fizykochemicznych na możliwość kontroli właściwości układów o potencjalnym znaczeniu biomedycznym

Wymuszone zmiany strukturalne w wybranych oligosacharydach

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

Celem badań była analiza wpływu różnych parametrów mikroskopowych i fizykochemicznych na możliwość kontroli zjawisk zachodzących w układach o znaczeniu biomedycznym. W szczególności, badania koncentrowano na wykorzystaniu zgromadzonych dotychczas informacji do zbudowania modeli wielofunkcyjnych, wykorzystujących zjawiska obserwowane wskutek sprzężonego wpływu wspomnianych parametrów. Oprócz badań nanorurek węglowych i dendrymerów jako nośników leków badano również zjawisko równowagi tautomerycznej w aldo- i ketoheksozach oraz próbowano wyjaśnić silniejsze preferencje tej ostatniej grupy związków to tworzenia pierścieni pięcioczłonowych. Ponadto, badano podstawowe konformacyjne stopnie swobody monomerów furanoz oraz piranoz (rotacja grup hydroksymetylowych, inwersja oraz pseudorotacja pierścieni) ze zwiększoną dokładnością, wykorzystując symulacje metodą dynamiki molekularnej z potencjałami *ab initio*.

Dotychczasowe prace nad wykorzystaniem nanorurek węglowych czy dendrymerów jako nanotransporterów cząsteczek leków mają głębokie uzasadnienie ze względu na szczególne znaczenie aplikacyjne. Kluczowym problemem jest zaprojektowanie takiego układu który wykazywałby dobrą rozpuszczalność w środowisku wodnym oraz pozwalał na wykorzystanie czynników fizjologicznych do inicjowania procesów uwalniania leków. Przeprowadzone do tej pory badania doprowadziły do bardzo obiecujących rezultatów. Jednakże, jak zaobserwowano we wcześniejszych badaniach, indywidualne wykorzystanie chemicznych sygnalizatorów inicjowania procesu uwalniania (czyli zmiany pH) lub czynników fizycznych (pole magnetyczne) zwykle prowadzi do niekoniecznie pełnej i oczekiwanej funkcjonalności układu. W przypadku nanorurki funkcjonalizowanej glikolem polietylenowym ze sprzężonymi resztami kwasu foliowego obserwuje się częściowe wnikanie do wnętrza nanorurki tych cząsteczek i blokowanie uwalniania doksorubicyny. Zastosowanie nanocząstek magnetycznych jako dodatkowych modyfikatorów układu daje możliwość uzyskania pełnej funkcjonalności. Badania ukierunkowane na poznanie właściwości konformacyjnych węglowodanów zaowocowały opracowaniem nowej metody obliczeniowej, która łączy zalety zarówno klasycznej dynamiki molekularnej, jak i obliczeń kwantowo-chemicznych. Dwustopniowa procedura polega na wybraniu zestawu konformerów które najtrafniej reprezentują strukturę cząsteczki węglowodanu oddziałującą z rozpuszczalnikiem, a następnie użycie tego zestawu w obliczeniach kwantowo-chemicznych. Natomiast badania właściwości fizykochemicznych funkcjonalnych nanonośników na bazie układów dendrymerowych prowadzi do opracowania metodologii otrzymywania stabilnych struktur hybrydowych o odpowiedniej funkcjonalności w sposób kontrolowany, które mogą być wykorzystane jako nośniki leków, materiały do testów immunologicznych czy materiały teranostyczne.

Układy typu nanorurka węglowa/cząsteczka barwnika/cząsteczka leku jak też dendrymery typu PAMAM wykazują użyteczne właściwości jako układy dostarczania leków o możliwym do zaimplementowania czynnikiem wyzwalającym uwalnianie leku, np. zmiana pH. Praktyczne wytworzenie takich układów wymaga jednak dodatkowych badań. Zmiany konformacyjne w cząsteczkach węglowodanów, obejmujące pierścienie piranozowe oraz furanozowe mogą być istotne dla oddziaływań z białkami oraz wymagają uwzględnienia przy stosowaniu technik obliczeniowych przewidujących strukturę naturalnych sacharydów.

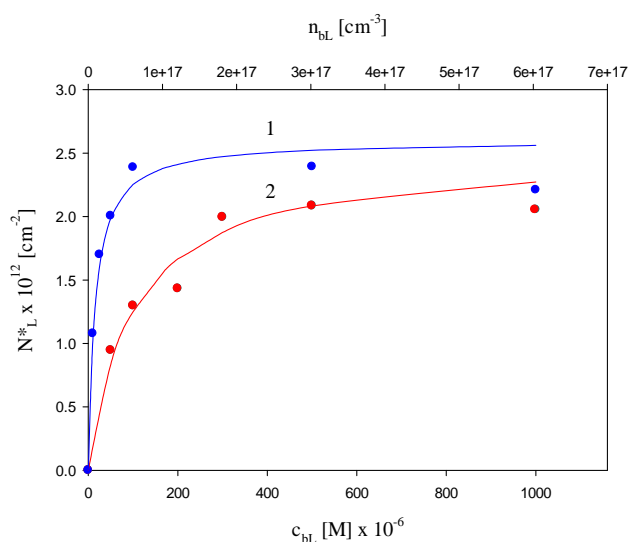
Nanostruktury materii miękkiej

13. Określenie topologii monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe oraz mechanizmów ich oddziaływań z ligandami jonowymi i makrocząsteczkowymi.

Wyznaczenie efektywności wiązania kationów dwuwartościowych przez warstwy albuminy osocza krwi

(prof. Zbigniew Adamczyk, dr hab. Jakub Barbasz, dr Marta Kujda, dr Aneta Michna, dr Maria Morga, dr Małgorzata Nattich-Rak, dr Marta Sadowska)

Albumina osocza krwi pełni wiele istotnych funkcji, min. umożliwia wiązanie ligandów endogennych i egzogennych oraz ich transportu do różnych tkanek. Ponadto monowarstwy albuminy mogą być stosowane jako biosensory do wykrywania i ilościowego oznaczania jonów: Cd^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} . Albumina stanowi również dodatek do środków kontrastowych, wykorzystywanych w obrazowaniu rezonansem magnetycznym (MRI). Dlatego też znajomość energii oraz miejsc wiązania jonów metali w cząsteczce albuminy może być wykorzystana do projektowania nowych biosensorów oraz różnych środków kontrastowych. Do tej pory badania dotyczące wiązania jonów metali przez albuminę zostały przeprowadzone jedynie w objętości za pomocą metod spektroskopowych, głównie dichroizmu kołowego oraz fluorescencyjnych. Brak jest natomiast informacji pozwalających wyznaczyć ilościowo zdolności wiązania jonów i ligandów niskocząsteczkowych do albuminy zaadsorbowanej na powierzchniach stałych. W związku z tym, celem przeprowadzonych badań była ilościowa charakterystyka wiązania jonów Cu^{2+} , Zn^{2+} do monowarstw albuminy zaadsorbowanej na powierzchni miki. W badaniach tych zastosowano techniki elektrokinetyczne, umożliwiające przeprowadzenie unikatowych pomiarów *in situ*. W ten sposób wyznaczono pokrycie ligandu N_L^* na podstawie zmierzonych zależności potencjału zeta monowarstwy albuminy od jego stężenia w objętości. Uzyskano izotermy wiązania tych ligandów przedstawione na Rys. 1. Izotermy te interpretowano przy użyciu modelu Gouya-Chapmana-Langmuira, co umożliwiło wyznaczenie równowagowej stałej adsorpcji K_a wynoszącej $3,77 \times 10^{-5}$ oraz $2,73 \times 10^{-4}$ cm odpowiednio dla jonów Zn^{2+} oraz Cu^{2+} . Odpowiada to energii wiązania $\Delta \phi_m = -8,0$ oraz -10 kT.



Rysunek 1. Izoterma adsorpcji jonów: 1) Cu^{2+} (●) i 2) Zn^{2+} (●) na powierzchni monowarstwy albuminy, przedstawiona jako zależność stężenia powierzchniowego ligandów N_L^* [cm^{-2}] od ich stężenia objętościowego c_{bL} [M] (oś dolna) i n_{bL} [cm^{-3}] (oś górna). Linie ciągłe przedstawiają wyniki teoretyczne obliczone dla izotermy Langmuira (pomiar przeprowadzono dla siły jonowej 10^{-2} M, pH 5,7, $T = 298$ K).

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

Kinetyczne aspekty formowania wielowarstw cząstek kulistych metodą "warstwa po warstwie"

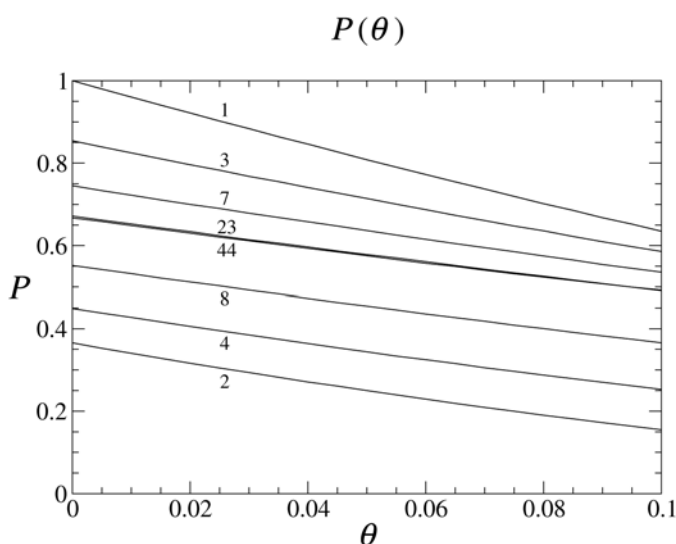
(dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN, dr hab. Jakub Barbasz, dr Piotr Batys)

Wielowarstwowa adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchni międzyfazowej ciecz-ciało stałe prowadzi do spontanicznej formacji cienkiego filmu porowatego, który ma znaczący wpływ na transport jonów z objętości roztworu do powierzchni adsorpcji. Umożliwia to wykorzystanie wielowarstw cząstek koloidalnych jako funkcjonalnych nanomateriałów, takich jak membrany czy katalizatory heterogeniczne. Prostą i efektywną metodą syntezy wielowarstw cząstek koloidalnych jest technika „warstwa po warstwie”. W trakcie syntezy zakłada się zazwyczaj, że utrzymanie stałego czasu adsorpcji kolejnych warstw pozwala na uzyskanie stałego pokrycia powierzchni. Założenie to nie jest jednak oczywiste.

Podstawowym celem naszych badań była weryfikacja powyższego założenia poprzez teoretyczny opis kinetyki adsorpcji kolejnych warstw. Proces adsorpcji wielowarstwowej z wykorzystaniem techniki „warstwa po warstwie” można opisać teoretycznie modelem przypadkowej adsorpcji sekwencyjnej. Model ten umożliwia ilościowy opis prawdopodobieństwa adsorpcji kolejnej cząstki koloidalnej przy danym pokryciu powierzchni. W celu określenia zależności prawdopodobieństwa adsorpcji cząstki od pokrycia i struktury wielowarstwy opracowaliśmy odpowiedni algorytm numeryczny i program komputerowy. Następnie wygenerowaliśmy pięć modelowych wielowarstw cząstek kulistych o pokryciu powierzchni kolejnych warstw $\theta_m = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ i 0.5 . Liczby pojedynczych warstw poszczególnych wielowarstw wynosiły odpowiednio 44, 25, 20, 18 i 17. Wielowarstwy te miały podobną średnią grubość ok. 30 promieni cząstki. Dla kolejnych warstw każdej z wielowarstw przeprowadziliśmy następnie obliczenia prawdopodobieństwa adsorpcji cząstki koloidalnej w funkcji pokrycia powierzchni, $P(\theta)$.

Otrzymane wyniki pozwoliły na sformułowanie interesujących wniosków. Istotnym parametrem determinującym zależność $P(\theta)$ jest maksymalne pokrycie powierzchni pojedynczej warstwy θ_m . W przypadku dużego maksymalnego pokrycia pojedynczej warstwy, $\theta_m = 0.5$, funkcja $P(\theta)$ liczona dla kolejnych warstw wielowarstwy wykazuje podobną zmienność. Wraz ze spadkiem wartości parametru θ_m funkcja ta wykazuje jednak coraz większą zależność od numeru warstwy. Zależność ta jest szczególnie znacząca w przypadku pierwszych warstw wielowarstwy. Wyniki uzyskane dla parametru $\theta_m = 0.1$ wskazują, że prawdopodobieństwa adsorpcji cząstki w trakcie syntezy pierwszej i drugiej warstwy różnią się o kilkaset procent. W tych warunkach założenie

o stałości pokrycia przy stałym czasie adsorpcji kolejnych warstw wydaje się całkowicie nieuprawnione.



Rysunek 1. Prawdopodobieństwo adsorpcji cząstki dla parametru $\theta_m = 0.1$ obliczone dla warstw 1, 2, 3, 4, 7, 8, 23 i 44.

15. Kinetyka powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni kwarcu w roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych

(dr hab. Jan Zawala, dr Dominik Kosior, dr Anna Niecikowska, mgr Agata Wiertel-Pochopień, dr Marcel Krzan)

Celem zadania badawczego było wyjaśnienie mechanizmów leżących u podstaw zmian odzysku flotacyjnego cząstek kwarcu, obserwowanego w testach laboratoryjnych prowadzonych w (i) roztworach heksyloaminy (rurka Hallimonda z pojedynczym pęcherzykiem) oraz (ii) czystych i mieszanych roztworach kationowej i niejonowej substancji powierzchniowo-aktywnej (mikroflotacja). Zadania związane z wpływem mieszanych odczynników flotacyjnych na odzysk kwarcu realizowano we współpracy z Wydziałem Inżynierii Górniczej Uniwersytetu w Dumlupinar w Turcji, natomiast wpływ krótkołańcuchowych amin na flotację kwarcu badano we współpracy z Wydziałem Geoinżynierii, Górnictwa i Geologii Politechniki Wrocławskiej. Wymienione jednostki partnerskie dostarczyły wyniki testów flotacyjnych. Naszym zadaniem było przeprowadzenie badań podstawowych, których wyniki mogłyby wytłumaczyć mechanizmy leżące u podstaw obserwowanych efektów dotyczących odzysku kwarcu. Badania wykonane w naszym laboratorium, w ramach realizacji niniejszego zadania statutowego, obejmowały pomiary kinetyki zderzeń i przyczepienia pojedynczego pęcherzyka gazu do monokrystalicznej powierzchni kwarcu oraz pomiary jej kątów zwilżania, w warunkach korespondujących z tymi, w jakich przeprowadzano testy flotacyjne.

W przypadku flotacji kwarcu w czystych roztworach kationowego surfaktantu (bromek n-hexadecylotrimethylammoniumowy – CTAB) obserwowano znaczny wzrost odzysku flotacyjnego, od około 10% do prawie 100%, kiedy stężenie roztworu CTAB-u wzrastało w przedziale 1×10^{-7} M - 1×10^{-3} M. Użycie niejonowej substancji powierzchniowo-aktywnej (n-oktanolu) jako dodatkowego składnika mieszaniny flotacyjnej umożliwiło znaczne obniżenia stężenia CTAB-u (o około 4 rzędy wielkości), koniecznego do uzyskania podobnej wartości odzysku. Na podstawie badań podstawowych wykonanych w naszym laboratorium stwierdzono, że w zależności od składu roztworu dwa różne czynniki decydują o przerwaniu filmu zwilżającego i przyczepieniu pęcherzyka do powierzchni kwarcu. W przypadku czystych roztworów CTAB-u czynnikami tymi były (i) destabilizujące (przyciągające) oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy powierzchnią kwarcu i pęcherzyka (w przedziale stężeń 1×10^{-7} M - 2×10^{-6} M) oraz (ii) wzrastająca hydrofobowość powierzchni kwarcu (dla stężeń $> 3 \times 10^{-6}$ M). W przypadku roztworów mieszanych, niejonowy n-oktanol wpływał tylko na kinetykę ruchu pęcherzyka, skracając czas jego odbić od powierzchni (wydłużając czas kontaktu pęcherzyk-powierzchnia ciała stałego), natomiast do pęknięcia ciekłego filmu niezbędne było przeładowanie powierzchni pęcherzyka (zmiana ładunku z ujemnego na dodatni), co możliwe było pomimo tego, że stężenia CTAB-u było niewielkie.

W przypadku flotacji cząstek kwarcu w roztworach heksyloaminy stwierdzono, że odzysk kwarcu rośnie wraz ze wzrostem stężenia roztworu oraz, że najlepsze wyniki, jeśli chodzi o uzysk obserwowane są w pH bliskim pK_a aminy. Wyniki badań przeprowadzonych w naszym laboratorium potwierdziły te obserwacje – zmiany czasu utworzenia TPC przez pojedynczy, uderzający w powierzchnię kwarcu pęcherzyk bardzo dobrze korelowały z wynikami testów flotacyjnych. Po analizie wyników, obejmującej analizę wpływu stężenia i pH roztworów heksyloaminy na prędkości i zmiany kształtu pęcherzyka, dynamiki jego odbić od powierzchni kwarcu oraz procentową zawartość cząsteczek zjonizowanych i niezjonizowanych heksyloaminy stwierdzono, że za przerwanie filmu odpowiada współadsorpcja obu tych form, zarówno na powierzchni pęcherzyka jak i na powierzchni kwarcu.

16. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

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

Głównym celem realizacji zadania było zbadanie wpływu wartościowości jonów z zastosowanego elektrolitu podstawowego na wytwarzanie funkcjonalnych cienkich filmów wielowarstwowych zawierających wybrane polielektrolity oraz określenie przepuszczalności tak otrzymanych struktur dla wybranych związków elektroaktywnych. W zależności od rodzaju elektrolitu podstawowego oraz polielektrolitu można otrzymać filmy o zróżnicowanych parametrach, co wykorzystujemy by jak najdokładniej kontrolować strukturę i właściwości fizykochemiczne (grubość, szorstkość oraz przepuszczalność dla wybranych makromolekuł), które determinują funkcjonalność badanych układów. Dzięki temu możemy zoptymalizować występowanie pożądanej cechy, jak odpowiednie parametry antyadhezyjne lub biobójcze, przewodnictwo czy fotoaktywność, a w przypadku nanokapsulek – kontrolowane uwalnianie substancji aktywnej.

W ramach zaplanowanych prac określono wpływ kationów jedno- i dwuwartościowych użytych jako elektrolity podstawowe (NaCl, MgCl₂) na dwa układy polielektrolitowe: PAH/PSS (poliallylamina/poli(sulfonian styrenu)) i PDADMAC/PSS (chlorek polidiallyldimetyloamoniowy/poli(sulfonian styrenu)). Dodatkowo, analizowano wpływ siły jonowej na tak zaprojektowane systemy, nakładając wielowarstwy z roztworów o sile jonowej I=0.015M oraz I=0.15M elektrolitu podstawowego. Przepuszczalność badanych filmów wielowarstwowych badano dla dwóch rodzajów cząstek elektroaktywnych: dodatnio naładowanego [Ru(NH₃)₆]²⁺ oraz równomolowego roztworu [Fe(CN)₆]⁴⁻ z [Fe(CN)₆]³⁻.

Zaobserwowano, iż ilość polielektrolitu zaadsorbowanego w obecności jonów Mg²⁺ jest większa w porównaniu do - osadzonej w roztworze Na⁺ o tej samej sile jonowej. Efekt ten był wyraźniejszy w przypadku filmów zawierających PDADMAC jako polikation. Wyniki woltamperometrii cyklicznej wskazują, że na przepuszczalność wielowarstw polielektrolitowych wpływa nie tylko rodzaj i wielkość jonów soli uczestniczących w tworzeniu filmu, ale także rodzaj (ładunek) sondy elektroaktywnej. W przypadku dodatnio naładowanego [Ru(NH₃)₆]²⁺ większość badanych multiwarstw nie wykazywało właściwości barierowych. Nasze wyniki potwierdziły, że właściwości barierowe filmów wielowarstwowych są zależne od efektu sterycznego, tj. od kumulacji cząsteczek w filmie i odpychania naładowanych cząsteczek przez analogicznie naładowane warstwy wewnątrz filmu. Do najważniejszych osiągnięć można zaliczyć eksperymentalne potwierdzenie, iż właściwości membran polielektrolitowych mogą być kontrolowane również przez wartościowość jonów elektrolitów podstawowych stosowanych w roztworach polielektrolitów podczas tworzenia filmów polielektrolitowych. Co więcej, wyniki pokazują, że przepuszczalność membran polielektrolitowych jest nierozzerwalnie związana z kompensacją ładunku i naturą cząsteczki, która jest transportowana przez film polielektrolitowy.

Wyniki prowadzonych prac planuje się wykorzystać przy opracowaniu technologii wytwarzania biokompatybilnych i bioaktywnych powłok o kontrolowanej przepuszczalności. Filmy polielektrolitowe mogą służyć do budowy biokompatybilnych mikrokapsulek o sterowanych właściwościach fizykochemicznych do zastosowania jako nośniki substancji aktywnych. Dodatkowo, możliwość wbudowania w strukturę powłok mikrokapsulek innych składników, jak nanocząstki, pozwala uzyskać zadaną funkcjonalność, np. zastosowanie cząstek fluorescencyjnych lub magnetycznych pozwala na wykorzystanie takich nanokompozytów jako nośników teranostycznych.

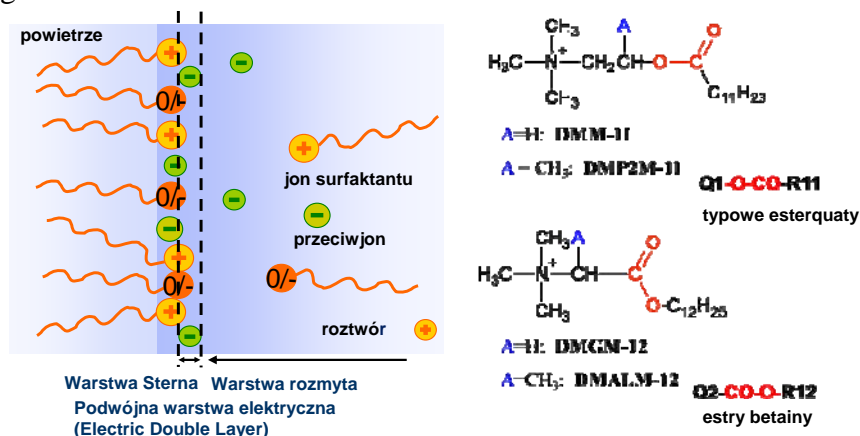
17. Właściwości surfaktantów degradowalnych jako emulsyfikatorów/ /stabilizatorów nanoemulsji

Opis adsorpcji surfaktantów degradowalnych typu esterquat lub aminoquat na swobodnej powierzchni

(prof. Piotr Warszyński, dr Ewelina Jarek, dr Krzysztof Szczepanowicz, inż. Marzena Noworyta)

Głównym celem realizacji zadania jest określenie właściwości adsorpcyjnych surfaktantów degradowalnych typu „esterquat” i/lub „amidoquat”, które zawierają w swej strukturze wiązanie estrowe lub amidowe ulegające hydrolizie. Wykorzystaliśmy rozszerzony model adsorpcji surfaktantów jonowych (STDE), który zakłada tworzenie się na powierzchni "quasi-dwuwymiarowego elektrolitu", do teoretycznego opisu izoterm napięcia powierzchniowego dla czterech surfaktantów typu esterquats: typowych esterquatów, bromku N, N, N-trimetylo-2-(dodekanoiloksy) –etanoamoniowego (DMM-11) i bromku N, N, N-trimetylo-2- (dodekanoiloksy)-1-metyloetanoamoniowego (DMP2M-11) z wiązaniem -O-CO- oraz estrów betainy, bromku dodecylo-oksykarbonylo-metylo-N, N, N-trimetyloamoniowego (DMGM-12) i bromku dodecylo-oksykarbonylo-1-etylo-N, N, N-trimetyloamoniowego (DMALM-12) z wiązaniem -CO-O- (Rysunek 1).

Wykazano, iż w zależności od struktury surfaktantu częściowa hydroliza może prowadzić do relatywnego zwiększenia aktywności powierzchniowej badanego układu. Efekt ten najbardziej widoczny jest w środowisku zasadowym (pH 10), co można wytłumaczyć obecnością aktywnych powierzchniowo produktów hydrolizy kwasu dodekanowego i dodekanolu. W 2017 roku wykorzystaliśmy metody obliczeniowe chemii kwantowej (ab initio Hartree-Focka oraz DFT) z różnymi bazami funkcyjnymi i modelami solwatacji do wyznaczenia relatywnego stopnia hydrolizy i uzasadnienia niektórych parametrów modelu stosowanych do opisu izoterm napięcia powierzchniowego.



Rysunek 1. Schematyczna ilustracja głównej koncepcji modelu adsorpcji napędzanej hydrolizą badanych esterquatów

Obliczenia pokazały, iż reakcja hydrolizy jest nieodwracalna. Bariera entropowa związana z obecnością stanu przejściowego (grupa OH przyłączona do karbonylowego atomu węgla), odzwierciedla zwiększony stopień hydrolizy w wysokim pH. Obecność bocznej grupy CH₃ (Rysunek 1, A=CH₃) powoduje zmniejszenie ładunku dodatniego na karbonylowym węglu (mniejsza elektrofilowość) i powstanie sterycznej przeszkody dla przyłączenia grupy OH. Metody chemii kwantowej pozwoliły oszacować gradację stopni dysocjacji dla produktów hydrolizy będących słabymi elektrolitami. Stosując metodę analizy kształtu wiszącej kropli wyznaczono również kinetyki adsorpcji (dynamiczne napięcia powierzchniowe) surfaktantów typu amidequat o różnej strukturze molekularnej w różnym pH i sile jonowej. Podjęliśmy próby zastosowania badanych surfaktantów (esterquats) do tworzenia nanoemulsji.

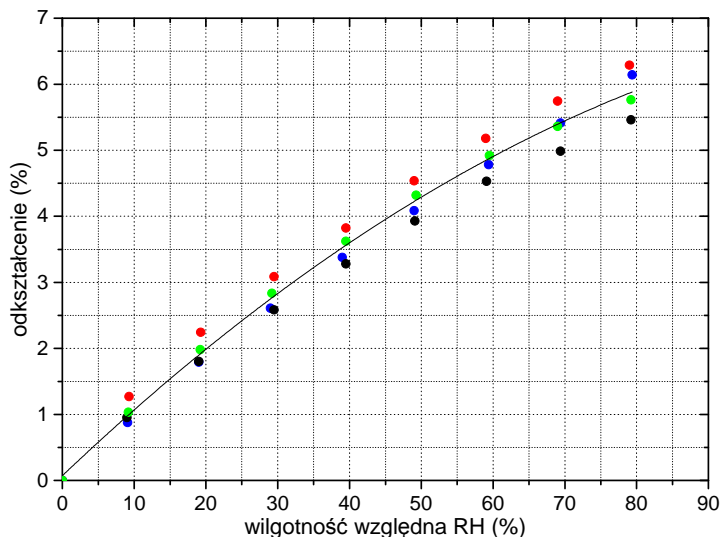
Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

18. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki mikroklimatu w ich otoczeniu

(prof. Roman Kozłowski, dr Leszek Krzemiń, dr Arkadiusz Kupczak, dr Marcin Strojecki)

Dotychczasowe badania odpowiedzi wilgotnościowej i mechaniki materiałów artystycznych skupiały się głównie na obiektach sztuk pięknych i rzemiosła artystycznego. Wynikiem tego ograniczenia stał się niekorzystny brak informacji odnośnie materiałów zabytkowych występujących w zbiorach bibliotecznych i archiwalnych – papieru, tektury, pergaminu i skóry. Stąd obecne zadanie badawcze polegało na rozszerzeniu ilościowej oceny fizycznego zagrożenia spowodowanego przez wahania klimatu na pergamin – materiał biblioteczny szczególnie wrażliwy na zmiany wilgotności i podatny na uszkodzenia, do którego należy dostosować wymogi bezpiecznych warunków środowiskowych w otoczeniu zbiorów bibliotecznych i archiwalnych.

Otrzymano dane na temat wilgotnościowej zmiany wymiarowej (odkształcenia) dla zbioru pergaminów współczesnych i zabytkowych (Rysunek 1). Pomiary wykonano w każdej próbce w dwóch prostopadłych do siebie kierunkach, aby uwzględnić uprzywilejowaną orientację włókien kolagenu, i wybrano większą wartość jako wielkość charakterystyczną.



Rys. 1. Przykładowe dane doświadczalne dotyczące wilgotnościowej zmiany wymiarowej (odkształcenia) w czterech próbkach zabytkowego pergaminu, które porównano z krzywą średnią obliczoną przez dopasowanie danych metodą najmniejszych kwadratów do wielomianu drugiego stopnia o postaci: $\text{odkształcenie (\%)} = 1.0335 \cdot 10^{-1} \cdot \text{RH} - 3.796 \cdot 10^{-4} \cdot \text{RH}^2$.

Zmierzono zależność odkształcenia od naprężenia rozciągającego i na tej podstawie określono odkształcenie będące granicą obszaru sprężystego, powyżej którego następuje trwała deformacja pergaminu. Otrzymano jako wartość średnią 1,9% w zakresie wilgotności względnej między 20 a 90%, który odzwierciedla warunki panujące we wnętrzach bibliotek. Szybkość absorpcji lub desorpcji pary wodnej przez pergamin jest duża w porównaniu z czasem fluktuacji wilgotności względnej – nowa równowagowa zawartość wody w materiale ustala się w czasie mniejszym niż godzina. Stąd wahania wilgotności względnej można łatwo przeliczać na zależność odkształcenia od czasu zakładając pełną odpowiedź wymiarową w każdej chwili fluktuacji. Kiedy podczas epizodów spadku wilgotności względnej pojawi się skurcz pergaminu przekraczający wartość krytyczną 1,9%, pojawiające się więzy ograniczające ruch arkuszy pergaminu na skutek sztywnej oprawy ochronnej lub połączenie z oprawami książek mogą doprowadzić do nadmiernego naprężenia rozciągającego i deformacji.

Ustalony algorytm opisujący zagrożenie pergaminu przez uszkodzenia zostanie dodany do oprogramowania HERIE – internetowego narzędzia do ilościowej oceny fizycznego zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania klimatyczne (dostępnego pod adresem herie.mnk.pl).

PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA BIS"

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

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

(kierownik projektu: prof. Tomasz Pańczyk)

W kolejnym etapie realizacji projektu badaniom poddano układ w którym nanorurka węglowa jest połączona hydrolizującymi w pH kwaśnym łańcuchami z nanocząstkami o rdzeniu magnetycznym. Przeprowadzone badania uwzględniają obecność czynników zwiększających biokompatybilność nanorurki węglowej (adsorpcja PEG na powierzchni) oraz nadających cech selektywności wobec komórek nowotworowych (obecność cząsteczek kwasu foliowego). W pH neutralnym, tj. na etapie przechowywania czy też cyrkulacji w krwioobieg, cząsteczki leku (w tym przypadku karmustyna) są szczelnie zamknięte we wnętrzu nanorurki dzięki kowalencyjnym wiązaniom (hydrazonowym) ze sfunkcjonalizowanymi nanocząstkami magnetycznymi. W przypadku kontaktu z komórką nowotworową dochodzi do selektywnego oddziaływania nośnika z receptorem kwasu foliowego i jego endocytozy. Dzięki niskiemu pH endosomów dochodzi do hydrolizy wiązań hydrazonowych lecz uwolnienie leku jest jeszcze niemożliwe ze względu na obecność silnych oddziaływań dyspersyjnych między nanorurką a nanocząstkami magnetycznymi. Ten etap działania nośnika może być obrazowany in situ przy użyciu MRI. Zastosowanie silnego zewnętrznego pola magnetycznego prowadzi do gwałtownych obrotów nanocząstek i otwarcia wewnętrznej przestrzeni nanorurki. Co więcej, zastosowanie zmiennego pola magnetycznego może doprowadzić do mechanicznej destrukcji nośnika i uwolnienia leku. Rozważany lek - karmustyna - jest stosowany w leczeniu nowotworów mózgu zaś jego administracja polega na wszczepieniu implantu. Zastosowanie omawianego nośnika pozwoliłoby na zastosowanie tradycyjnej administracji leku gdyż nośniki leków oparte na strukturze nanoigieł mają zdolność do przechodzenia przez barierę krew-mózg. Układ ten należy uznać za największe osiągnięcie projektu lecz ze względu na ograniczoną ilość miejsca nie może tu być bardziej szczegółowo opisany.

Badany wcześniej nośnik doksorubicyny, wykorzystujący efekt protonacji cząsteczek barwników inicjowany zmianą pH w procesie endocytozy przez komórki nowotworowe, wykazywał zbyt silne blokowanie leku przez obecność łańcuchów FA-PEG. W kolejnym etapie przedstawiono koncepcję oraz jej weryfikację teoretyczną dotyczącą usprawnienia działania tego rodzaju nośników leków. Idea tego usprawnienia polegała na wprowadzeniu do wnętrza nanorurki węglowej, obok barwnika, obiektów nanostrukturalnych: albo lekkich cząsteczek fulerenów C₃₂₀ albo ciężkich nanocząstek koloidalnych (również magnetycznych). Rolą tych nanocząstek było wypchnięcie z wnętrza nanorurki oraz rozluźnienie struktury przestrzennej łańcuchów FA-PEG po obniżeniu pH środowiska. Istotnie, obserwowano, że cząsteczki barwników wywierały ciśnienie zdolne do wypchnięcia nanocząstek poza granice nanorurki lecz nie obserwowano całkowitego oderwania się nanocząstek od nanorurki. Analiza wpływu zewnętrznego pola magnetycznego doprowadziła do obserwacji, że pole to wywołuje jedynie gwałtowne obroty nanocząstek wokół własnej osi, co z kolei prowadzi do translacji i obrotów całego układu w związku z zasadą zachowania momentu pędu.

Uzyskane wyniki mają duże znaczenie praktyczne w dziedzinie projektowania nośników leków, w których czynnikiem wyzwalającym uwalnianie leku jest zmiana pH z fizjologicznego ~7 do kwaśnego ~5 co zachodzi w endosomach lub tkance nowotworowej. Architektura molekularna tych układów jest prosta. Pozwala to na bezpośrednie wykorzystanie uzyskanych wyników w syntezie takich materiałów.

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

Projekt badawczy "Sonata Bis" NCN 2014/14/E/NZ1/00053 [2015-2020]

(kierownik projektu: prof. Tomasz Borowski)

W ramach tego projektu realizujemy ściśle powiązane ze sobą badania strukturalne, biochemiczne oraz obliczeniowe nad dwiema grupami dioksygenaz zależnych od 2-oksoglutaranu uczestniczących w biosyntezie alkaloidów. Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury tych białek oraz szczegółowych mechanizmów ich reakcji katalitycznych.

W ramach prac doświadczalnych w minionym roku zoptymalizowano warunki hodowli i nadekspresji dwóch badanych białek (parametry hodowli podlegające zmianom: szczep komórek kompetentnych, rodzaj wektora ekspresyjnego, rodzaj podłoża hodowlanego, warunki tlenowe hodowli, temperatura i czas nadekspresji białek w komórkach), oraz zoptymalizowano protokoły oczyszczania białek z wykorzystaniem chromatografii powinowactwa do unieruchomionych jonów metali oraz sączenia molekularnego. Zoptymalizowano protokół oczyszczania dla pierwszego z białek, dla drugiego prace będą kontynuowane. Zoptymalizowano warunki krystalizacji pierwszego z białek. Krystalizację prowadzono z wykorzystaniem metody siedzącej kropli oraz komercyjnie dostępnych zestawów odczynników. Zoptymalizowano stężenie białka w kropli, stosunek objętościowy białka do roztworu krystalizacyjnego, stężenie ligandów. Do tej pory przeprowadzono około 30 eksperymentów krystalizacyjnych i otrzymano osad krystaliczny. Dla trzeciego badanego białka uzyskano kryształy i rozwiązano struktury kompleksów tego białka z 2-oxoglutaranem oraz z bursztynianem. Wyniki pomiarów metodą ICP-OES oraz analiza sygnału anomalnego pozwoliły na zidentyfikowanie Ni^{2+} jako jonu związanego w miejscu aktywnym tego białka. Podejmowano liczne próby ko-krystalizacji i nasączenia kryształów substratem. Dodatkowo wyznaczono mutacje mogące mieć potencjalnie wpływ na selektywność reakcji oraz rozpoczęto prace nad optymalizacją warunków hodowli i nadekspresji tych mutantów. Dla czwartego badanego białka przeklonowano jego gen do stosownego plazmidu, co pozwoliło na otrzymywanie białka w wysokim stężeniu w fazie rozpuszczalnej. Przeprowadzono szereg prób krystalizacji, w niektórych z nich otrzymano mikro kryształy białkowe.

W ramach badań obliczeniowych wykonano serię symulacji klasycznej dynamiki molekularnej dla trzeciego białka i jego kompleksów z substratami. Uzyskane wyniki pozwoliły na zaproponowanie prawdopodobnego sposobu wiązania substratów, które gwarantuje obserwowaną regiospecyficzność reakcji.

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

Projekt badawczy "Sonata Bis" NCN 2015/18/E/ST4/00234 [2016-2020]

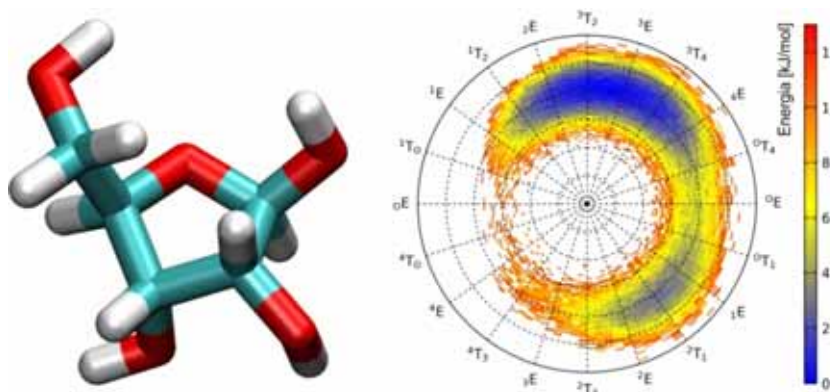
(kierownik projektu: dr hab. Wojciech Plaziński, prof. IKiFP PAN)

Parametryzacja pola siłowego GROMOS dla furanoz oraz funkcjonalizowanych piranoz

Celem badań była szczegółowa parametryzacja pola siłowego typu *united-atoms* GROMOS. Badania prowadzone były dwutorowo. Po pierwsze, opracowane zostały parametry opisujące konformację grup egzocyklicznych (hydroksylowych, hydroksymetylowych, oksymetylowych) połączonych z pierścieniem furanozowym, jak również wpływ ww. grup na elastyczność pierścienia. Po drugie, wyprowadzono parametry opisujące konformację grupy karboksylowej (w trzech możliwych stanach chemicznych, tj. zdeprotonowanym, sprotonowanym oraz alkielowanym), podstawionej do pierścienia piranozowego.

Procedura parametryzacji bazowała częściowo na obliczeniach kwantomechanicznych, a częściowo na dopasowaniu parametrów pod kątem zgodności z dostępnymi danymi eksperymentalnymi dotyczącymi cząsteczek cukrów oddziaływujących z rozpuszczalnikiem. Walidacji dokonano w kontekście zgodności z danymi NMR (np. stałe sprzężenia protonów wicynalnych) oraz XRD a także parametrami termodynamicznymi (np. wiązanie jonów wapnia przez karboksylowane piranozy).

Opracowane parametry pola siłowego dotyczą szerokiej grupy związków chemicznych, ważnych z punktu widzenia biologii i biochemii żywych organizmów. W szczególności: kwasów uronowych (np. pektyny, alginiany), ketoheksoz (np. fruktoza), aldopentoz (np. ryboza, deoksyryboza), aldotetroz (np. treoza) i wielu innych. Ponadto, możliwe jest ich użycie w przypadku badania bardziej złożonych układów, zawierających, poza cukrami, inne typy biomolekuł.



Rysunek 1. Cząsteczka β -D-rybofuranozy oraz obliczony, odpowiadający jej profil energii swobodnej ilustrujący preferowaną geometrię pierścienia.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA"

1. Wcelowane dostarczanie leków-synteza i funkcjonalizacja nanonośników

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/03/D/ST5/05635 [2012-2017]

(kierownik projektu: dr hab. Krzysztof Szczepanowicz)

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

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

W 2017 roku zakończono projekt. Postawiony cel został zrealizowany w następujących etapach:

- Rozwinięto metodę otrzymywania nanokapsułek techniką LbL na rdzeniach emulsyjnych,
- Opracowano metodę otrzymywania nanocząstek kompleksów polielektrolitowych zawierających czynniki aktywne (np. RNA, DNA),
- Przeprowadzono modyfikację i funkcjonalizację powłok kapsułek w celu uzyskania selektywnego wiązania na drodze rozpoznawania molekularnego,
- Przeprowadzono ocenę cytotoksyczności badanych kapsułek, określenie lokalizacji oraz wpływ otrzymanych nanokapsułek na modelowe komórki.

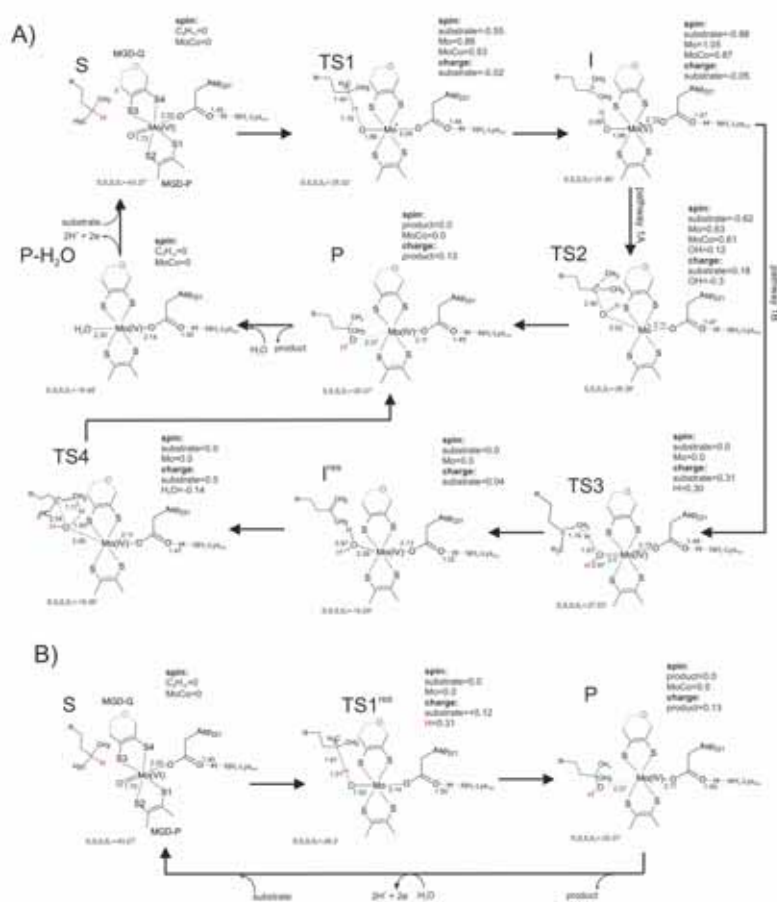
2. Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium denitrificans*

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

(kierownik projektu: dr hab. Maciej Szaleniec prof. IKiFP PAN)

Celem projektu jest przebadanie mechanizmu reakcji hydroksylacji pochodnych. Celem projektu było przebadanie mechanizmu reakcji hydroksylacji pochodnych cholesterolu przez dehydrogenazę C25 sterolową. Ostatnie miesiące projektu poświęcono na konsolidację wyników i sformułowanie ostatecznej hipotezy dotyczącej mechanizmu reakcji.

Do badania mechanizmu w oparciu o modele klasterowe zastosowano metodę DFT i DFT+D2.



Rysunek 1. Schemat 3 wariantów mechanizmu katalitycznej reakcji utleniania cholest-4-en-3-onu. A) ścieżka zapoczątkowana przez homolityczne rozcięcie C-H, B) ścieżka zapoczątkowana przez heterolityczne rozcięcie C-H.

Przeprowadzone badania wykazały, że najbardziej prawdopodobna jest rodnikowa aktywacja wiązania C-H prowadząca do rodnikowego stanu przejściowego **I** i quasi-rodnikowego procesu OH rebound (**TS2**). Po dysocjacji produktu następuje spontaniczna addycja ligandu wody do zredukowanego Mo(IV). W ramach ścieżki 1 możliwy jest alternatywny proces transferu elektronu wspomaganego transferem protonu PA-ET (**TS3**) prowadzący do odwodornionego produktu przejściowego **I^{res}**. Ponieważ taki produkt nie był obserwowany eksperymentalnie założono, że musiałby on ulegać hydratacji (**TS4**). Proces ten jednak, ze względu na dużą stabilność **I^{res}** okazał się kinetycznie nieprawdopodobny. Badania izotopowe pozwoliły również potwierdzić sformułowaną hipotezę – eksperymentalny KIE wyniósł 4.5. Obliczony kinetyczny efekt izotopowy (intrinsic KIE) dla

TS1 wynosi 7.4 (7.07 dla dużego modelu), a dla **TS2** 1.66 (1.59 dla dużego modelu). Efekt dla heterolitycznego rozerwania wiązania C-H wyniósł **2.8**, zaś dla procesu utleniającego odwodornienia (**TS3**) 3.02 lub 1.57 dla przeniesienia odpowiednio atomu D lub H. Dla procesu addycji wody iKIE wyniósł 1.34 (zakładając przeniesienie D₂O). Tak więc, tylko na ścieżce 1A obliczony iKIE był wyższy niż obserwowany KIE w eksperymencie. Wykazano również, że w przypadku całego modelu podjednostki α (model QM:MM) następuje spontaniczna dysocjacja produktu z pierwszej sfery koordynacyjnej atomu Mo(IV).

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

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

(kierownik projektu: dr hab. Jan Zawala)

Celem projektu było zbadanie wpływu kontrolowanych zaburzeń powierzchni ciecz/gaz na mechanizm koalescencji pęcherzyków gazowych w czystych cieczach o różnych parametrach fizykochemicznych. W trakcie realizacji projektu badawczego przeprowadzono równoległe eksperymenty i obliczenia teoretyczne mające na celu określenie tzw. nadmiarowego przyspieszenia granicznego powierzchni ciecz/gaz, powodującego znaczne przedłużenie czasów życia uderzających w tę powierzchnię pęcherzyków (czasu koalescencji) w stosunku do powierzchni znajdującej się w spoczynku. Pęcherzyki powietrza wytwarzane były w kontrolowany sposób na kapilarach szklanych o różnej średnicy wewnętrznej. Pomiary prowadzono dla wody destylowanej oraz czystych olejów silikonowych o precyzyjnie zdefiniowanych parametrach fizykochemicznych (lepkość i napięcie powierzchniowe). Ze względu na różnice w napięciu powierzchniowych badanych cieczy, dla jednakowego zakresu średnic kapilar (0.025 - 0.15 mm) wartości promienia generowanych w kontrolowany sposób pęcherzyków (R_b) w wodzie i oleju zmieniały się odpowiednio w zakresie 0.51 - 0.87 mm oraz 0.31 - 0.60 mm.

Wykazano, że dla każdego rozmiaru pęcherzyka istnieje określona wartość amplitudy i częstotliwości drgań powierzchni ciecz/powietrze (czyli przyspieszenia nadmiarowego), poniżej której czas życia (koalescencji) pęcherzyka jest porównywalny z czasem dla powierzchni swobodnej (spoczywającej), a powyżej której ulega on znacznemu wydłużeniu nawet o kilka rzędów wielkości. Ponadto stwierdzono, że im większa jest średnica pęcherzyka tym mniejsze. Obserwacja ta była dodatkowym potwierdzeniem postulowanego teoretycznie mechanizmu odbić pęcherzyka od powierzchni międzyfazowej, w którym rozmiar powstającego filmu ciekłego, determinowany zdolnością pęcherzyka do deformacji, jest parametrem o kluczowym znaczeniu.

Określono także wpływ i wzajemne relacje pomiędzy (i) promieniem pęcherzyka (R_b), (ii) napięciem powierzchniowym cieczy oraz (iii) wartościami granicznego przyspieszenia związanego z drganiem powierzchni ciecz/gaz na prawdopodobieństwo przedłużenia czasu życia uderzających pęcherzyków (wzrost stabilności filmu pianowego). Wykazano, że wartość granicznego przyspieszenia związanego z kontrolowanym drganiem powierzchni ciecz/gaz ściśle zależy od wielkości pęcherzyka (jego promienia - R_b) i właściwości fizykochemicznych cieczy (napięcia powierzchniowego). Niezależnie od rodzaju cieczy, wartość granicznego przyspieszenia w funkcji częstotliwości drgań rosła wraz ze spadkiem wartości R_b . Ponadto, porównując wartości przyspieszeń pęcherzyków o zbliżonych rozmiarach, ale wytworzonych w różnych cieczach, stwierdzono, że przyspieszenie graniczne jest znacznie mniejsze dla cieczy o niższym napięciu powierzchniowym. Uzyskane wyniki potwierdziły hipotezę postulującą, że prawdopodobieństwo przedłużenia „czasu życia” pęcherzyka na powierzchni ciecz/gaz związane jest z deformacją podczas jego odbić od powierzchni (w momencie kolejnych zderzeń), która warunkuje rozmiar promienia filmu ciekłego, rozdzielającego powierzchnię pęcherzyka od powierzchni cieczy. Zdolność deformacji natomiast zależy ściśle od wartości ciśnienia Laplace'a (Δp). Im jest ono większe (im mniejsza jest wartość R_b), tym wyższe wartości przyspieszeń należy zastosować (pęcherzyk musi uderzać w powierzchnię z większą siłą), aby stopień jego deformacji, a co za tym idzie promień utworzonego filmu ciekłego, był odpowiednio duży, aby nie nastąpiła koalescencja.

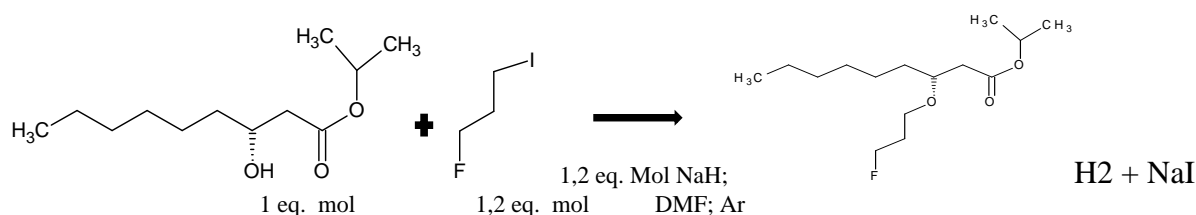
5. Biosynteza nowych estrów laktozy za pośrednictwem lipaz. Charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i przeciwrakowych

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2015/17/D/ST4/00514 [2016-2019]

(kierownik projektu: dr Maciej Guzik)

Etap 1 c.d.: Przygotowanie prekursorów dla biokatalitycznej syntezy estrów

Etap ten obejmował chemiczną modyfikację monomerów polihydroksynonanianu (PHN) polegającą na zabezpieczeniu grupy -OH przy 3C łańcucha alifatycznego. Zabezpieczenie to ma na celu nadać monomerom PHN właściwości przeciwrakowe, oraz zapobiec reagowaniu tej grupy z grupami karboksylowymi. Polega ono na utworzeniu wiązania eterowego C-O-C z alkilem fluorowca bądź grupą fenylową za pomocą reakcji SN1 z udziałem katalizatora np. NaH.



Udało się utworzyć i oczyścić produkt za pomocą chromatografii Versa-Flash. Wydajność tego procesu to 11,75%. Warunki reakcji jednak i dalsza obróbka produktu wymagają jeszcze optymalizacji. Drugim przykładem reakcji zabezpieczania gr. C3-OH za pomocą gr. fenylovej pochodzącej z soli diarylo-jodo-trifluoro-metano-sulfonowej z udziałem katalizatora miedziowego (CuOTf, toluen, w 100°C. - reakcja arylowania dioli). Otrzymano nieoczyszczony jeszcze produkt z wydajnością 67,7%. Analiz dokonano z pomocą RP-HPLC-MS kolumna c18. Wszystkie reakcje prowadzono w Instytucie Farmakologii PAN we współpracy z dr Jakubem Staroniem.

Etap 2 c.d.: Badania przesiewowe lipaz

Etap polegał na kontynuacji i rozwinięciu zadań z poprzedniego roku projektu, tj. optymalizacji warunków reakcji i detekcji produktów transestryfikacji laktozy za pomocą immobilizowanych lipaz, monomerami PHN i ich pochodnych na przykładzie estru metylovego kw. nonanowego, oraz estrów z zabezpieczeniem allilowym, alkilem monofluorowca. Na podstawie doniesień literaturowych oraz badań przesiewowych uznano, że najwydajniej reakcja przebiega w środowisku 2-metylo 2-butanol w stosunku molowym estru do laktozy 1:3 w 55 °C. Maksymalne stężenia można uzyskać do 48h prowadzenia reakcji otrzymując do 25,5% konwersji względem stężenia laktozy, w przypadku estru c9-laktozowego. Najlepiej działające enzymy to amano lipaza *Thermomyces lanuginosa*, *Pseudomonas cepacia* oraz lipaza B *Candida antarctica*. Jeśli chodzi o estryfikacje cukru alkilem fluorowca najlepiej działające lipazy to: EL 03; EL 04; EL 09; EL 17; EL 20; EL 30; EL 70 spośród 32 przetestowanych lipaz firmy Eucodis Bioscience; dając do 16% konwersji oraz lipaza B *Candida antarctica* dająca 5,8% konwersji.

Etap 3: Synteza chemiczna estru laktozowego kwasu nonanowego

Skorzystano z patentu F. Scholnicki, M.K. Sucharski oraz W.M. Infield, Eastern Regional Research Center Philadelphia, Pennsylvania 19118, w której estryfikowano laktozę kwasem nonanowym z udziałem katalizatora K₂CO₃ w DMSO w 50 °C Jednak ta reakcja jest niespecyficzna tj. dostarcza mono-, di-, tri- estrów i powoduje trudności w oczyszczeniu monoestru. Bardziej efektywne okazało się doprowadzenie kw. C9 do formy chlorku za pomocą chlorku oksalilu w DCM z kropla DMF, jako katalizatorem. W takiej postaci kwas reaguje z uprzednio suszoną laktozą w DMF. Monoester laktozy rozdzielono od frakcji diestru, oraz samej laktozy na kolumnie preparatywnej RP-c18 Versa Flash w układzie 70% MeOH/ 30% H₂O otrzymując 19,9% konwersji. Wydajność planuje się zwiększyć zmieniając metodę suszenia laktozy i mediów reakcyjnych.

6. Mechanizmy tworzenia i funkcjonalność multiwarstw nanocząstek zawierających biokompatybilne molekuly

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2015/17/D/ST4/00569 [2016-2019]
(kierownik projektu: dr Maria Morga)

Zrealizowane w 2017 cele badawcze projektu SONATA obejmowały: (i) wyjaśnienie mechanizmów tworzenia biwarstw nanocząstek na powierzchni substratów mika, krzem; (ii) określenie stabilności biwarstw nanocząstek o określonej strukturze i właściwościach elektrokinetycznych; (iii) opracowanie powtarzalnej procedury tworzenia dobrze zdefiniowanych, stabilnych biwarstw nanocząstek ($\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Ag}$, $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$) i monowarstw makromolekuł (poli-*L*-lizyny - PLL, poli-*L*-argininy – PARG, chlorowodoru polialliloaminy – PAH) na powierzchniach substratów mika, krzem oraz (iv) opracowanie efektywnej procedury pomiarowej dla charakterystyki biwarstw nanocząstek jak również nanofilmów makrojon-nanocząstka w warunkach *in situ*.

W toku badań, stosując modelowanie RSA oraz elektrokinetyczny model 3D skorelowano pokrycie monowarstw oraz biwarstw nanocząstek z wartościami potencjału zeta utworzonych nanostruktur. Znając kinetyki osadzania cząstek tlenkowych: hematytu oraz krzemionki jak również makrojonów oraz cząstek metalicznych o określonych właściwościach powierzchniowych, wykonano szereg badań elektrokinetycznych mających na celu określenie mechanizmów tworzenia biwarstw w układach: nanocząstka-nanocząstka oraz makrojon-nanocząstka w warunkach *in situ*. Dodatkowym elementem nowości, niespotykanym w literaturze przedmiotu, było określenie wpływu pierwszej warstwy (warstwy prekursorowej) na potencjał zeta tworzonych biwarstw oraz ich stabilność. W tym celu, w celce pomiarowej, formowano monowarstwy o różnym stopniu pokrycia: $\theta = 0.03$, $\theta = 0.07$, $\theta = 0.15$, $\theta = 0.17$, $\theta = 0.20$, aż do upakowanej monowarstwy $\theta = 0.34$ w sile jonowej 10^{-2}M NaCl. Na tak utworzonych warstwach prowadzono proces formowania biwarstw w układzie: $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Ag}$, $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$, oraz PLL-Ag. Zbadano, że we wszystkich przypadkach potencjał zeta biwarstw osiąga wartość bliską (dla pokryć $\theta \leq 0.03$, 0.05) bądź równą (pokrycia $\theta \geq 0.07$) wartości potencjału zeta upakowanej monowarstwy cząstek tworzących warstwę zewnętrzną. Jest to nietypowe zachowanie, sprzeczne z założeniami klasycznej teorii DLVO, gdyż na ujemnie naładowanej powierzchni osadzają się ujemnie naładowane cząstki drugiej warstwy. Efekty te zostały opisane w sposób ilościowy w oparciu o niejednorodny rozkład ładunku w pierwszej warstwie substratu (hematyt, PLL). Prowadzi to do powstania lokalnych miejsc adsorpcyjnych, wykazujących dodatni ładunek, w przeciwieństwie do ujemnej powierzchni substratu (mika, krzem). Dodatkowo, dla wyżej wymienionych układów, z wykorzystaniem metody potencjału przepływu, wykonano szereg badań nad kinetyką desorpcji, określając energie wiązania tworzonych biwarstw nanocząstek. Analizując profile energii wiązania dla analizowanych układów biwarstw nanocząstek określono liczbę cząstek pierwszej warstwy koordynujących cząstki warstwy drugiej, odpowiedzialną za stabilność powstałych nanostruktur. Dla przykładu, w układzie $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$, stosując teorię DLVO wykazano, że oddziaływania elektrostatyczne są dominującymi siłami odpowiedzialnymi za stabilność utworzonej biwarstwy oraz określono minimum energii równe $m = -18,1$ kT, wykazując tym samym, że na jednej cząstce hematytu adsorbuje się jedna cząstka krzemionki. Z drugiej strony potwierdzono obecność nieodwracalnie związanej frakcji nanocząstek krzemionki, dla której jedna cząstka krzemionki koordynowana jest przez więcej niż jedną cząstkę hematytu.

Oprócz istotnego znaczenia jako układów odniesienia, wyniki badań stanowią podstawę do rozwinięcia uniwersalnej metody wytwarzania materiałów wielowarstwowych o dobrze kontrolowanych właściwościach powierzchniowych.

7. Bio oligo/polisacharydy pod wpływem sił zewnętrznych

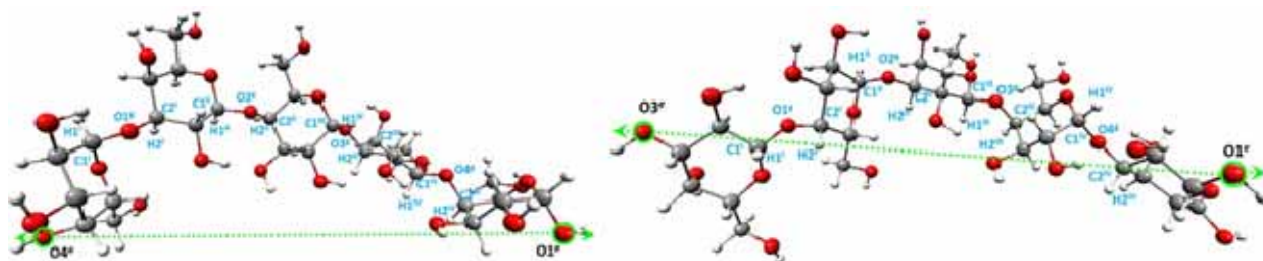
Projekt badawczy "Sonata" NCN DEC-2015/19/D/ST4/01979, SONATA 10 [2016-2019]
(kierownik projektu: dr Agnieszka Brzyska)

Głównym celem projektu jest zbadanie i teoretyczny opis możliwych zmian konformacyjnych/strukturalnych w bio-oligo/polisacharydach wymuszonych przez siły zewnętrzne. W okresie, za jaki składane jest niniejsze sprawozdanie badania dotyczyły głównie wpływu:

(i) typu i położenia podstawników w pierścieniu piranozowym
(ii) typu i położenia wiązania glikozydowego
na charakter i przebieg wymuszonych przejść konformacyjnych w cząsteczkach wybranych oligosacharydów.

(i) Rozważono cząsteczki zawierające pierścienie piranozowe z dwiema grupami hydroksylowymi w pozycji 1 i 4. W każdym przypadku zastosowano metodę EGO (ang. *Enforced Geometry Optimization*) do zbadania wymuszonych zmian wewnątrzcząsteczkowych dla obu możliwych konformerów krzeselkowych 1C_4 i 4C_1 z obiema grupami hydroksylowymi zorientowanymi aksjalnie. Uzyskane wyniki dostarczają nowych informacji na temat mechanizmu wymuszonych przejść konformacyjnych, które silnie zależą od pozycji i typu podstawników w pierścieniu piranozowym.

(ii) Przeanalizowane zostały oligomery pozbawione grup sulfonowych (do pentameru – patrz Rys. 1) oparte na strukturze karagenu z dwoma typami wiązań glikozydowych ($\alpha(1\rightarrow4)$ i $\beta(1\rightarrow3)$). W badanych układach zidentyfikowano cztery różne typy wymuszonych przejść konformacyjnych (${}^4C_1\rightarrow{}^1C_4$, ${}^4C_1\rightarrow{}^1S_3$, ${}^4C_1\rightarrow B_{3,0}$, ${}^4C_1\rightarrow{}^2S_0$). Generalnie typ przejścia konformacyjnego zależy również bezpośrednio od pozycji pierścienia galaktopiranozowego w łańcuchu oligosacharydu. Skomplikowana odpowiedź ma działanie zewnętrznych sił rozciągających w badanych układach molekularnych jest ściśle powiązana z obecnością dwóch różnych typów wiązań glikozydowych.



Rysunek 1. Dwie możliwe struktury pentameru i sposób przyłożenia zewnętrznych sił rozciągających. Indeksy górne *a* i *e* oznaczają aksjalną i ekwatorialną pozycję terminalnych grup –OH.

Uzyskane wyniki pozwalają stwierdzić, że interpretacja krzywych rozciągania AFM może być bardzo trudna. Nie każde plateau odpowiada przejściu konformacyjnemu, a nie każde przejście jest wyraźnie widoczne. Takie sytuacje są wysoce prawdopodobne w przypadku bardziej złożonych układów molekularnych, np. dla heteropolimerów z powtarzającymi się jednostkami połączonymi przez różne typy wiązań glikozydowych.

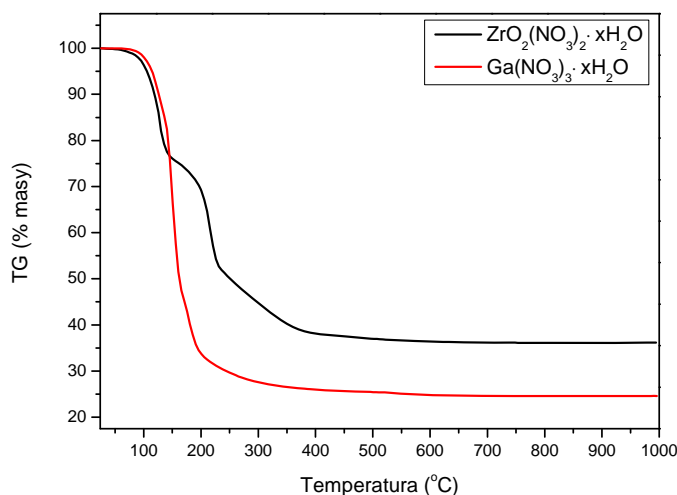
8. Wpływ struktury krystalograficznej ZrO_2 na aktywność katalizatorów Cu/ZrO_2 i Cu/ZrO_2-ZnO domieszkowanych Ga, Mn i Ni w reakcji niskotemperaturowego reformingu parowego bio-etanolu.

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2016/23/D/ST4/02492 [2017-2020]

(Kierownik projektu: dr Michał Śliwa)

W ramach zaplanowanych prac zakupiono odczynniki chemiczne niezbędne do syntezy katalizatorów (tj.: uwodnione, odpowiednie azotany miedzi, cynku, galu, manganu, niklu, azotan cyrkonu, czynniki strącające: Na_2CO_3 , $NaOH$) oraz drobny sprzęt laboratoryjny (biurety, elektrodę do pH-metru, elementy szklane do wyparki próżniowej).

Metodą DSC-TG przeprowadzono badania mające na celu określenie zawartości wody w azotanie (V) galu oraz w azotanie cyrkonu. Wyznaczony z krzywych TG (Rysunek 1) ubytek masy dla azotanu (V) galu oraz azotanu cyrkonu wynosił odpowiednio 75,4 %, i 63,9 %, co odpowiada siedmiu wodom hydratacyjnym w azotanie (V) galu i sześciu wodom hydratacyjnym w azotanie cyrkonu.



Rysunek 1. Krzywe TG prekursorów metali

Wykonano pomiary termo-programowalnej redukcji wodorem (H_2 -TPR) wzorca CuO . Pomiary wykonano w reaktorze przepływowym z detekcją MS, dla czterech różnych ilości CuO rozcieńczonych odpowiednio w Al_2O_3 . Na podstawie otrzymanych krzywych TPR wykonano kalibrację detektora MS na wodór, w zakresie spodziewanych stężeń w przypadku redukcji próbek katalizatorów. W trakcie pomiaru H_2 -TPR monitorowano linie $m/z = 2$ (H_2) oraz $m/z = 18$ (H_2O).

Zaprojektowano układ katalityczny do reakcji reformingu parowego etanolu. Układ do testowania katalizatorów będzie składał się z: odparownika CEM firmy Bronkhorst wraz systemem masowych regulatorów przepływu dla gazów i cieczy, grzanej linii doprowadzającej gazy do kwarcowego reaktora przepływowego wraz systemem zaworów VICI-Valco, pieca i chromatografu gazowego (HP 5890 Series II) wyposażonego w detektory TCD i FID.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "OPUS"

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

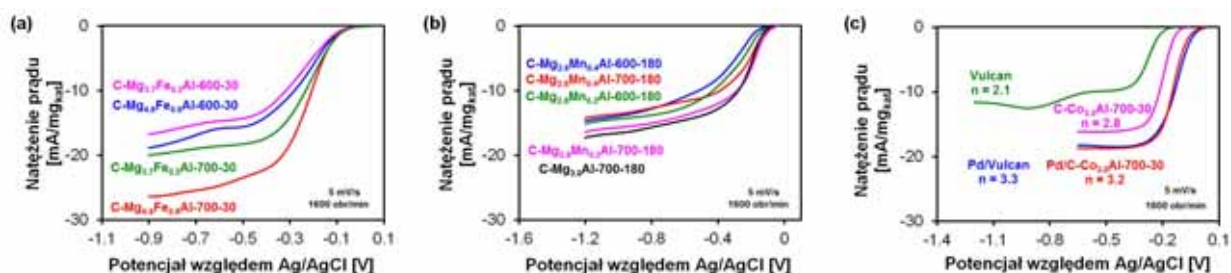
Projekt badawczy "Opus" NCN 2013/11/B/ST5/01417 [2014-2017]

(kierownik projektu: dr Aleksandra Pacuła)

Sprawdzono właściwości elektrokatalityczne preparatów w reakcji redukcji tlenu za pomocą woltamperometrii cyklicznej oraz woltamperometrii z liniowo zmieniającym się potencjałem w środowisku zasadowym (0.1 M KOH).

Pomiary przeprowadzono w układzie trójelektrodowym, który stanowiły: elektroda z węgla szklanego, którego powierzchnia pokryta była badana próbka (elektroda robocza), drut platynowy (przeciwelektroda) i elektroda chlorosrebrowa (elektroda odniesienia).

Materiały węglowe otrzymane z prekursorów Mg-Fe-Al (Rysunek 1a) były bardziej aktywne w reakcji redukcji tlenu niż te otrzymane z prekursorów Mg-Mn-Al czy Mg-Al (Rysunek 1b). Liczba elektronów (n) biorących udział w reakcji redukcji tlenu w obecności badanych próbek zawierała się w przedziale $2 < n < 3$, co wskazywało na przebieg reakcji głównie według 2-elektronowej (niepożądaney) ścieżki, a w mniejszym stopniu według 4-elektronowej (pożądaney) ścieżki. Zatem nowe materiały kompozytowe nie stanowią lepszych materiałów katodowych w porównaniu z komercyjnym katalizatorem platynowym, ale materiały węglowe domieszkowane azotem ze względu na znaczną powierzchnię właściwą mogą służyć jako nośniki substancji aktywnych katalitycznie w innych zastosowaniach.



Rysunek 1. Porównanie krzywych woltamperometrycznych (LSV) zarejestrowanych w elektrolicie podstawowym (0.1 M KOH) nasyconym tlenem przy użyciu wirującej elektrody z węgla szklanego pokrytego warstwą materiału elektrodowego otrzymanego z prekursorów typu Mg-Fe-Al (a) typu Mg-Mn-Al i Mg-Al (b) oraz katalizatorów zawierających cząstki palladu na nośnikach węglowych i odpowiednich nośników (c).

Nanocząstki Pd zdyspergowane na nośnikach węglowych otrzymanych zarówno z prekursora Mg-Fe-Al, jak i z prekursorów Mg-Mn-Al oraz Mg-Al były nieaktywne w elektrochemicznej reakcji redukcji tlenu. Dla porównania zdyspergowano nanocząstki Pd na komercyjnym materiale węglowym (niedomieszkowanym azotem). Próbka była aktywna w reakcji redukcji tlenu. Podobny rezultat odnotowano po osadzeniu nanocząstek Pd na nośniku węglowym (domieszkowanym azotem) otrzymanym z prekursora Co-Al (Rysunek 1c). Zaobserwowano wpływ właściwości fizykochemicznych nośnika węglowego na jego ekspozycję a tym samym na jego aktywność elektrochemiczną. Nowe materiały węglowe otrzymane z prekursorów typu Mg-Al, Mg-Fe-Al i Mg-Mn-Al nie są lepszymi nośnikami palladu niż komercyjny materiał węglowy.

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

Projekt badawczy "Opus" NCN 2013/09/B/ST5/00983 [2014-2017]

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Celem badań było zaprojektowanie i synteza nowej klasy aktywnych i termicznie stabilnych tlenkowych katalizatorów pełnego utleniania, mogących stanowić alternatywę dla kosztownych katalizatorów wykorzystujących metale szlachetne z grupy platynowców. Zaproponowane podejście zasadało się na połączeniu dwóch syntetycznych procedur: jednej, prowadzącej do otrzymania organopochodnych warstwowych krzemianów typu smektytów oraz drugiej, polegającej na wytworzeniu nanocząstek tlenkowych metodą odwróconych miceli.

W charakterze warstwowego krzemianu wykorzystywano naturalny montmorillonit oraz syntetyczny smektyt Laponit, które stosowano zarówno jako formy sodowe, jak i pochodne organiczne otrzymane przez wymianę jonów Na^+ na kationy $(\text{C}_{16}\text{H}_{33})\text{N}(\text{CH}_3)_3^+$. Nanostruktury tlenkowe (np. Mn-Al-O, Mn-Cu-Al-Zr-Ce-O, TiO_2) otrzymywano z prekursorów syntezowanych metodą odwróconej miceli. Uzyskane kompozyty poddawano kalcynacji w temperaturze 450 i 600°C. Otrzymane materiały scharakteryzowano przy pomocy XRF, XRD, SEM, HRTEM, spektroskopii XPS, FTIR i Ramana, H_2 TPR, oraz sorpcji N_2 w -196°C i przetestowano w reakcji katalitycznego spalania toluenu. Wyniki testów katalitycznych wykazały, że wszystkie katalizatory otrzymane wg nowej procedury charakteryzowały się wyższą aktywnością katalityczną w spalaniu lotnych zanieczyszczeń organicznych niż ich odpowiedniki otrzymane w sposób konwencjonalny, bez stosowania metody odwróconej miceli. Ponadto kompozyty otrzymane w środowisku organicznym były bardziej aktywne niż ich odpowiedniki otrzymane w środowisku wodnym. Stwierdzono, że nanocząstki tlenków otrzymanych w wyniku kalcynacji kompozytów złożonych z organo-smektytów i odwróconych miceli z hydrotalkitowym lub wodorotlenkowym rdzeniem charakteryzują się małymi rozmiarami, zdeterminowanymi wielkością miceli, oraz wysoką krystalicznością, wynikającą z działania w trakcie kalcynacji dodatkowego efektu cieplnego powstającego przy spalaniu *in situ* organicznej składowej kompozytów. Wykazano, że tlenkowa faza aktywna z prekursora micelnego może mieć wielopierwiastkowy skład, co ma zasadnicze znaczenie w inżynierii materiałów katalitycznych, pozwala bowiem na optymalizację właściwości strukturalnych, teksturalnych i redoksowych kompozytu, a co za tym idzie, jego właściwości katalitycznych.

Ponadto, w ramach projektu zrealizowano kształcenie 2 osób w zakresie inżynierii zaawansowanych materiałów katalitycznych na poziomie studiów magisterskich i doktoranckich.

3. Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu katalizujące atypowe reakcje utleniania - badania nad strukturami oraz mechanizmami enzymatycznymi

Projekt badawczy "Opus" NCN 2014/15/B/NZ1/03331 [2015-2017]

(kierownik projektu: prof. Tomasz Borowski)

W projekcie tym obiektami badawczymi były nowo zidentyfikowanych dioksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu katalizujące złożone reakcje, których mechanizmy działania pozostają niejasne. Katalizowane przez te enzymy reakcje to: a) synteza etylenu b) utleniająca deaminacja kanamycyny A oraz c) tworzenie mostka endonadtlenkowego (w syntezie toksyny grzybowej – ang. verruculogen). Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury przestrzennej białek oraz uzyskanie wglądu w przebieg ich reakcji katalitycznych.

W ramach badań doświadczalnych w przeciągu ostatniego roku przeprowadzono optymalizację warunków krystalizacji białek EFE i KanJ oraz optymalizację procedury syntezy homologu EFE o innej aktywności katalitycznej. W przypadku EFE z *Pseudomonas Syringae* udało się otrzymać kryształy z produktem (bursztynianem) poprzez kokryształizację. Kryształy zostały poddane dyfrakcji a uzyskane obrazy posłużyły do wyznaczenia 3 struktur przestrzennych w rozdzielczości do 1.5 Å i zawierających bursztynian i 2 produkty jego rozkładu: malonian i octan. Wykonano skany fluorescencyjne w celu identyfikacji metalu znajdującego się w miejscu aktywnym. Przeprowadzono również próby zamiany metalu w miejscu aktywnym, ale nie udało się otrzymać innych kryształów. W przypadku homologu EFE z *Penicillium chrysogenum*, który nie produkuje etylenu, prowadzono optymalizację procedury produkcji białka w celu zwiększenia jego rozpuszczalności. W tym celu prowadzone były hodowle bakteryjne przy użyciu różnych szczepów bakteryjnych *E. coli*.

W przypadku KanJ z organizmu *Streptomyces kanamyceticus* prowadzono optymalizację warunków krystalizacji białka. Kryształy kompleksów enzym-substraty otrzymano poprzez nasączenie i kokryształizację a ich struktury zostały rozwiązane dzięki nasączeniu kryształów związkami jodu. Rozwiązano i udokładniono 4 struktury zawierające: sam metal, α -ketoglutaran, kanamycynę oraz α -ketoglutaran i rybostamycynę. Wyniki skanów fluorescencyjnych potwierdziły obecność niklu w miejscu aktywnym.

W ramach badań obliczeniowych przebadano ścieżki reakcji dla dwóch enzymów: FtmF oraz KanJ. W pierwszym przypadku wyniki obliczeń potwierdziły katalityczną rolę grupy tyrozynowej znajdującej się w miejscu aktywnym oraz pozwoliły na wytłumaczenie obserwowanej regiospecyficzności reakcji. Dodatkowo, w symulacjach MD udało się wyznaczyć prawdopodobne miejsce wiązania askorbinianu, a obliczenia kwantowo-chemiczne pokazały, że jest on efektywnym reduktorem zamykającym cykl reakcji FtmF. W przypadku KanJ przeprowadzono symulacje MD dla kilku wariantów kompleksu enzym-substraty i na podstawie uzyskanych trajektorii wybrano model do klasterowych obliczeń kwantowo-chemicznych. Badania nad mechanizmem reakcji ujawniły znaczne różnice w mechanizmie reakcji w zależności od stopnia jonizacji kluczowej grupy aminowej.

4. Teranostyczne nanonośniki do obrazowania MRI

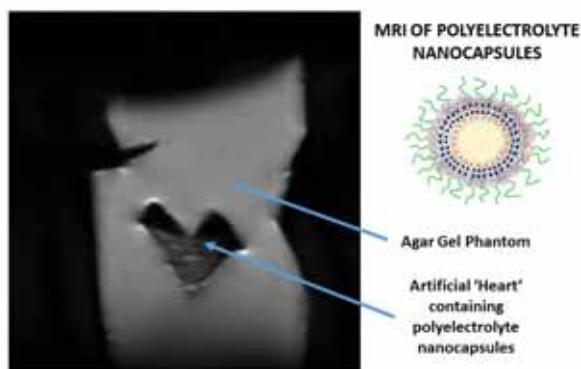
Projekt badawczy "Opus" NCN 2015/17/B/ST5/02808 [2016-2019]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Choroby neurodegeneracyjne, nowotwory, zakażenia bakteryjne i wiele innych stają się poważnym problemem obecnych czasów, zwłaszcza w obliczu starzenia się społeczeństwa. Jedną z najważniejszych wad obecnie stosowanych tzw. klasycznych terapii jest czasoprzestrzenna nieselektywność, czyli brak selektywnego działania preparatów tylko w ściśle określonym miejscu w organizmie. Powoduje to wiele niekorzystnych działań ubocznych na skutek oddziaływania leku w całym organizmie, również na zdrowe jego części. Uzasadniona wydaje się zatem próba znalezienia takiej drogi kontrolowanego dostarczania substancji terapeutycznej, która skutkowałaby działaniem substancji aktywnej tylko w ściśle określonym, chorobowo zmienionym, miejscu organizmu. Rozwiązaniem tego problemu jest rozwój metod „inteligentnego” transportu leków tylko do części organizmu dotkniętych zmianami chorobowymi np. zmianami nowotworowymi, co pozwoli na: redukcję koniecznych do stosowania dawek, zmniejszenie możliwych negatywnych skutków ubocznych oraz obniżenie kosztów terapii. Zintegrowanie tego typu transportu leków z jednoczesnym monitorowaniem ich dostarczenia do chorobowo zmienionych organów będzie stanowić przełom w medycynie.

Nanomedycyna jest dziedziną badań o ogromnych oczekiwaniach dotyczących rozwoju spersonalizowanej medycyny w oparciu o zastosowanie nanocząstek w celach terapeutycznych czy diagnostycznych. Badania w zakresie nanomedycyny dostarczają potencjalnych rozwiązań odnośnie diagnostyki i leczenia np. chorób nowotworowych. Jednak wiele schorzeń wymaga inteligentnego podejścia – gdzie stosuje się terapię i diagnostykę jednocześnie aby dobrać skuteczną dla danego pacjenta dawkę leku. Teranostyka – termin stanowiący kombinację słów terapia oraz diagnostyka – opisuje sposób postępowania, gdzie odpowiedni rodzaj terapii dobiera się na podstawie wyniku testu lub badania, czyniąc krok w kierunku medycyny personalizowanej. Dzięki materiałom i możliwościom jakie dostarcza nam nanotechnologia, teranostyka umożliwia jednoczesne dostarczenie leku oraz monitorowanie procesu leczenia w czasie rzeczywistym. Celem naukowym projektu jest zgromadzenie podstawowej wiedzy będącej u podstaw metod tworzenia nanonośników substancji leczniczych mogących pełnić również funkcje diagnostyczne, tzw. nanonośników teranostycznych, w celu opracowania bezpiecznych i wydajnych nano-układów dla spersonalizowanej terapii.

W 2017 roku skupiono się na preparatyce nanokapsulek polielektrolitowych jako nośników substancji aktywnych z możliwością jednoczesnej detekcji za pomocą MRI. Nanokapsułki otrzymywano metodą opracowaną w naszym instytucie tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych tzw. metodą warstwa po warstwie. Nanocząstki tlenków żelaza zostały użyte jako jedna lub dwie warstwy powłoki polielektrolitowej. Wielkość uzyskanych nanokapsulek to ~100nm. Przeprowadzono obrazowanie MR wytworzonych nanoukładów w roztworach i przy wykorzystaniu fantomów z żelu agarowego.



Obrazowanie MRI polielektrolitowych nanokapsulek w fantomie żelowym

5. Hierarchiczne katalizatory zeolitowe typu Y i omega nowej generacji: badania zaawansowanymi metodami IR, NMR oraz modelowanie molekularne

Projekt badawczy "Opus" NCN 2015/17/B/ST5/00023 [2016-2019]

(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)

Przedmiotem badań trzyletniego projektu badawczego jest poprawa właściwości centrów aktywnych w zeolitach. Centra takie są zlokalizowane w mikroporach, z czym wiążą się zarówno zalety (obecność bardzo silnych centrów kwasowych, stabilizacja karbokationu przez ujemny ładunek sieci oraz kształtoselektywność) jak i wady (wolna dyfuzja reagentów wąskich kanałach). Można to usunąć przez hierarchizację zeolitów czyli wprowadzenie dodatkowego systemu mezoporów. Najprostszą i najtańszą metodą jest desilikacja z użyciem roztworów zasad; większość dotychczasowych prac w tym zakresie dotyczyła desilikacji zeolitów wysokokrzemowych (np. ZSM-5). Nowością naszych badań jest dodatkowa desilikacja zeolitu Y o wyjściowym module krzemowym Si/Al = 31, otrzymanego przez dealuminację komercyjnego zeolitu Y.

Zmiennymi parametrami były: rodzaj zastosowanej zasady (NaOH, NH₃.aq, TBAOH - wodorotlenek tetrabutylamonowy oraz mieszanina NaOH/TBAOH o różnym stosunku molowym), temperatura procesu oraz warunki traktowania zeolitu po desilikacji. Status Si i Al został określony na drodze pomiarów MAS NMR oraz XPS. Porowatość materiałów przebadano przy użyciu niskotemperaturowej adsorpcji N₂, a kwasowość - ilościowych pomiarów IR. Naturę centrów Lewisa zdefiniowano stosując niskotemperaturową sorpcję CO. Badano także moc kwasową i heterogeniczność zeolitycznych grup Si-OH-Al. Wpływ desilikacji na właściwości katalityczne odniesiono do reakcji izomeryzacji α -pinenu. Grupy Si-OH₁-Al w wyjściowym zeolicie były homogeniczne i bardzo silnie kwasowe. Były one silniej kwasowe niż w większości innych, silnie kwasowych zeolitów (np. ZSM-5, mordenit). Działanie rozcieńczonego NaOH w temperaturze pokojowej prowadzi do usunięcia ok. 80% Si, amorfizacji zeolitu oraz utraty kwasowych Si-OH-Al a samo TBAOH usuwa bardzo małe ilości Si przy zachowaniu struktury zeolitu. Struktura zeolitu jest także zachowana po działaniu mieszaniny NaOH/TBAOH, która umożliwia ekstrakcję ok. 40% Si. Działanie NaOH/TBAOH powoduje otrzymanie zeolitu o dobrej krystaliczności, jak również wysokim stężeniu i mocy kwasowej Si-OH-Al. Zachowana jest przy tym mikroporowatość, lecz powstają mezopory o znacznej objętości i powierzchni (0.90 cm³/g i 450 m²/g). Najlepszą porowatość otrzymuje się dla mieszaniny desilikującej zawierającej 10 mol% TBAOH. Jest to także wariant najtańszy, bowiem TBAOH jest odczynnikiem droгим. Wzrost temperatury desilikacji do 65°C nie zmienia wyraźnie ani kwasowości ani porowatości.

Zeolity desilikowane mieszaniną NaOH/TBAOH wykazały wyjątkowo wysoką aktywność katalityczną w izomeryzacji α -pinenu, która była znacznie wyższa niż wyjściowego desilikowanego FAU-31 czy ZSM-5. Obserwowany wynik przypisano koincydencji dwóch zalet: wysokiej mezoporowatości oraz bardzo dużej kwasowości. Modelowanie kwantowo-chemiczne odtworzyło bardzo duże obniżenie częstości drgań grup OH w wyniku oddziaływania z cząsteczkami CO, co potwierdziło wyjątkowo wysoką kwasowość centrów Bronsteda w dealuminowanym i desilikowanym fojazycie. Wyniki badań były podstawą dwóch publikacji, jedna przyjęta do druku a druga po pierwszych recenzjach.

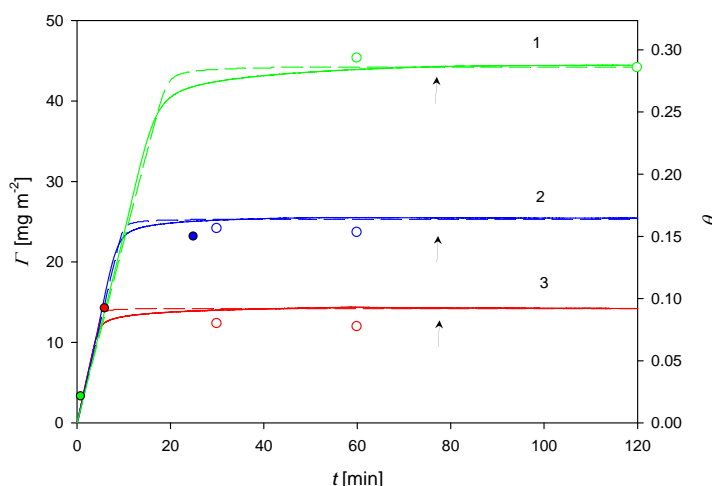
Spodziewamy się zaproponować ogólną procedurę otrzymywania aktywnych katalizatorów o bardzo wysokiej kwasowości, dobrej dostępności centrów aktywnych oraz o nienaruszonej strukturze materiału porowatego w wyniku jego łagodnej desilikacji, poprzedzonej dealuminacją (wyjściowe materiały o wysokim module Si/Al).

6. Monowarstwy nanocząstek o kontrolowanej heterogeniczności i strukturze jako efektywne substraty antyadhezyjne

Projekt badawczy "Opus" NCN 2015/07/B/ST5/00847 [2016-2019]

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

W ramach przeprowadzonych prac określono mechanizmy osadzania nanocząstek złota o dodatnim ładunku powierzchniowym na sensorze krzemowo/krzemionkowym. Zastosowano szereg bezpośrednich technik pomiarowych, min. metodę mikrowagi kwarcowej (QCM), mikroskopii elektronowej (TEM, SEM), mikroskopii sił atomowych (AFM), itd. Nanocząstki o wielkości 12 ± 3 nm (TEM) były syntetyzowane na drodze redukcji chemicznej przy użyciu borowodoru sodu jako reduktora oraz chlorowodoru cysteaminy. Stabilność suspensji nanocząstek dla różnych sił jonowych i pH była wyznaczana przy pomocy techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS). Dodatni potencjał zeta cząstek malał z siłą jonową oraz pH i wynosił 56 mV dla pH 4,2, $I=10^{-4}$ M oraz 22 mV dla pH 8,3, $I=3 \times 10^{-3}$ M. W sposób systematyczny określono wpływ stężenia objętościowego suspensji, siły jonowej roztworu oraz pH środowiska na kinetykę osadzania nanocząstek. Wykazano, że osadzanie nanocząstek przebiegało według mechanizmu nieodwracalnej adsorpcji, co umożliwiło precyzyjnie wyznaczyć pokrycia maksymalne monowarstw, które wzrastały systematycznie wraz ze wzrostem siły jonowej (Rysunek 1). Efekt ten interpretowano przy pomocy hybrydowego modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji przy uwzględnieniu oddziaływań elektrostatycznych między osadzonymi cząstkami. Pomiary QCM kalibrowano przez bezpośrednie wyznaczenie pokrycia nanocząstek przy pomocy obrazowania SEM i AFM (Rys. 1). W ten sposób uzyskano jednoznaczność zależność funkcyjną umożliwiającą wyznaczenie pokrycia nanocząstek na powierzchniach stałych w warunkach *in situ* i wykazano nieznaczne hydratacje tych monowarstw. Dzięki temu, wyznaczono absolutne wartości współczynników przenoszenia masy, które mogą być zastosowane do ilościowej interpretacji adsorpcji białek, w szczególności stopnia dynamicznej hydratacji ich cząsteczek. Ponadto uzyskane wyniki mogą być wykorzystane do wytwarzania efektywnych biosensorów służących do detekcji cząsteczek makrojonów (białek).



Rysunek 1. Kinetyka osadzania nanocząstek złota na powierzchni sensora Si/SiO₂ wyznaczona przy użyciu mikrowagi kwarcowej dla różnych sił jonowych: 1) 3×10^{-3} M, 2) 10^{-3} M and 3) 10^{-4} M; stężenie objętościowe suspensji 50 mg L^{-1} , pH 5.7 and $T=298$. Linie ciągłe przedstawiają wyniki eksperymentalne, a linie przerywane wyniki teoretyczne obliczone z modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji (eRSA). Punkty oznaczają wyniki uzyskane przy użyciu metody AFM (●, ●, ●) oraz SEM (○, ○, ○). Początek pomiarów desorpcji oznaczono przy pomocy strzałek.

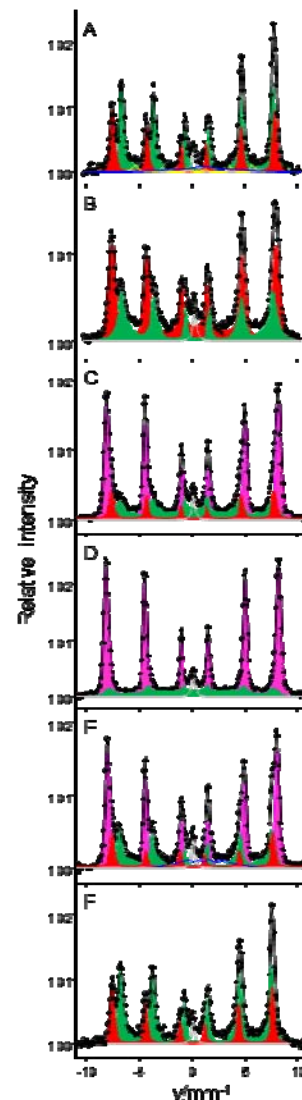
7. Magnetyczne nanocząstki na periodycznych matrycach tlenków żelaza: stabilizacja magnetyzmu i jego kontrola zewnętrznym polem elektrycznym.

Projekt badawczy "Opus" NCN 2016/21/B/ST3/00861 [2017-2020]

(kierownik projektu: dr hab. Nika Spiridis prof. IKiFP PAN)

Prowadzone badania wpisują się w zadanie projektu mające na celu otrzymanie powierzchni monokrystalicznych warstw tlenków żelaza z dobrze zdefiniowaną periodycznością oraz strukturą elektronową i magnetyczną na podłożu Pt(111). Badano przemiany fazowe w ultracienkich warstwach epitaksjalnych tlenków żelaza. Dotychczasowe doniesienia literaturowe z tej tematyki dotyczą przede wszystkim materiałów litych i nanocząstek, natomiast wyniki badań cienkich warstw są nieliczne i obejmują jedynie dane uzyskane metodami powierzchniowymi, takimi jak LEED, LEEM czy STM. Jak do tej pory najważniejsze wnioski dotyczące transformacji magnetyt-hematyt obejmują kinetykę, ścieżki utleniania i wpływ podłoża. W szczególności, podczas gdy dla Ag(111) transformację magnetytu do hematytu można odwrócić poprzez wygrzewanie w warunkach ultra wysokiej próżni (UHV), to dla Pt(111) redukcja $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ do Fe_3O_4 wymaga naniesienia dodatkowego żelaza. W ramach projektu badano in situ transformację magnetytu w hematyt na Pt(111) za pomocą kombinacji metod powierzchniowych i spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji (CEMS). Ta druga metoda pozwala na badanie całej objętości cienkiej warstwy.

Przygotowano 5-nm warstwę magnetytu poprzez reaktywną depozycję żelaza 57 w atmosferze tlenu (8×10^{-6} mbar) na podłożu Pt(111) w temperaturze 520 K. Terminacja regularna powierzchni warstwy $\text{Fe}_3\text{O}_4(111)$ uzyskiwana była przez wygrzewanie próbki w ultra wysokiej próżni (UHV), w temperaturze 830 K. Następnie tak przygotowaną warstwę magnetytu kilkakrotnie utleniano przy ciśnieniu parcjalnemu tlenu na poziomie $1\text{-}2 \times 10^{-5}$ mbar i sumarycznej ekspozycji ok. 21500 L. Po utlenieniu próbkę zredukowano poprzez wygrzewanie w UHV. Rysunek przedstawia widma CEMS w ważnych etapach preparacji i transformacji fazowych warstwy tlenków żelaza. Widmo po preparatyce (A) wykazuje charakterystyczne dla magnetytu składowe, czyli składową pochodzącą od jonów Fe^{3+} w położeniach tetraedrycznych (czerwona krzywa) oraz od jonów $\text{Fe}^{2.5+}$ w położeniach oktaedrycznych (zielona krzywa). Dodatkowo występują składowe o małej intensywności związane z jonami Fe w warstwie powierzchniowej (niebieska krzywa), w warstwie interfejsowej z podłożem (żółta krzywa) i atomami Fe rozpuszczonymi w podłożu Pt (szara krzywa). W miarę ekspozycji próbki na tlen wyróżnić można następujące kluczowe etapy: poniżej 4500 L magnetyt ulega transformacji w kierunku hematytu (B), dla 7500 L obserwuje się początek tworzenia fazy hematytu (fioletowa krzywa od rys. C) współistniejącego z magnetytem/magnetitem, a dla końcowej dawki 21500 L cała objętość warstwy transformuje się w hematyt (D). Długotrwałe wygrzewanie próbki w UHV prowadziło początkowo do częściowej (E), a potem całkowitej (F) redukcji hematytu z powrotem do magnetytu. Proces ten zależał silnie od temperatury, a jego początek odnotowano w 630 K.



8. Opracowanie nowoczesnej technologii wytwarzania stabilnych biologicznych filmów powierzchniowych o właściwościach drobnoustrojóbójczych i leczniczych

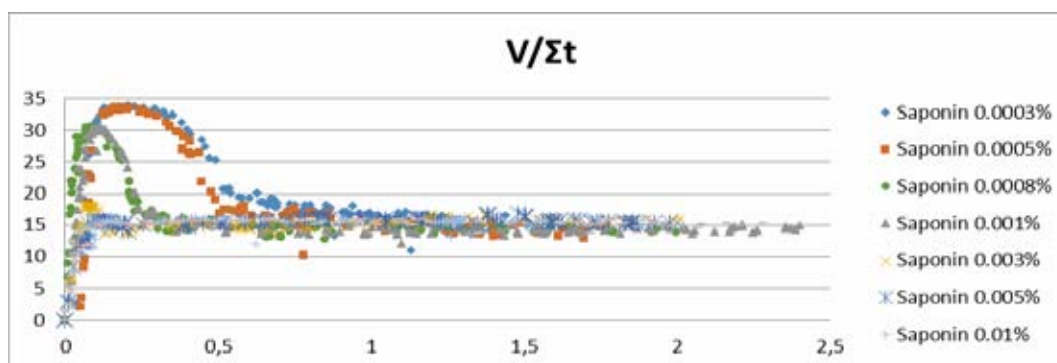
Projekt badawczy "Opus" NCN 2016/21/B/ST8/02107 [2017-2020]

(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

Celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania i nanoszenia stabilnych cienkich filmów powierzchniowych zbudowanych na bazie mieszanin hypoalergicznycy, nietoksycznych bio-polimerów, głównie tzw. zielonych surfaktantów (białek, polisacharydów, glikolipidów i fosfolipidów). Kompozycje filmów biologicznych zostaną dodatkowo wzbogacone o inne biopolimery, nieaktywne powierzchniowo, ale odznaczające się dużą aktywnością biologiczną biopolimery (np. drobnoustrojóbójczą, grzybobójczą lub regeneracyjną względem skóry ludzkiej), tj. chitozan, celuloza bakteryjna, kwas hialuronowy czy lewan. 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 formułacji 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. W celu osiągnięcia tego efektu planujemy szczegółowe badania badanych roztworów biopolimerów.

W trakcie pierwszego roku projektu wykonano pomiary dynamicznej i równowagowej aktywności powierzchniowej, elastyczności powierzchniowej oraz badania prędkości wynoszenia pęcherzyków gazowych w roztworach wybranych biopolimerów, t.j. saponiny (herbal extract saponin), sproszkowanego białka kurzego (egg white), białka serwatkowego (whey protein) oraz w ich mieszaninach. W trakcie eksperymentów zbadaliśmy wpływ zmian pH na procesy adsorpcji przebiegające w badanych roztworach. Na podstawie uzyskanych wyników określono przedziały stężeń badanych substancji i mieszanin niezbędne do wykształcenia stabilnego filmu pianowego, co zostało zweryfikowane we wstępnych testach w aparacie do pomiarów stabilności pian oraz za pomocą metody double-syringe.

Uzyskane wyniki zostały zaprezentowane na konferencji naukowej 7th Bubble and Drops international workshop, Lyon 26-30 June 2017 (dwie prezentacje, 1 ustna i 1 poster) oraz zgłoszone na 17th Food Colloids Conference, 2018, Univ. Of Leeds, UK.



Rysunek 1. Prędkości wynoszenia pęcherzyków w roztworach saponin (herbal extract saponin)

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

Projekt badawczy "Opus" NCN 2016/21/B/ST4/03798 [2017-2020]
(kierownik projektu: dr hab. Maciej Szaleniec prof. IKiFP PAN)

Celem projektu jest przebadanie mechanizmu reakcji odwodornienia steroidów katalizowanej przez dehydrogenazę Δ^1 -cholest-4-en-3-onu (AcmB). Enzym ten pochodzi z denitryfikującej bakterii *Sterolibacterium denitrificans* i należy do klasy 3-ketosteroidowych dehydrogenaz FAD-zależnych. Enzym katalizuje utleniające odwodornienie 3-ketosteroidów skutkujące wprowadzeniem wiązania podwójnego pomiędzy atomami węgla C1-C2 w pierścieniu A steroidów. Projekt zakłada pozyskanie dużej ilości enzymu i poznanie jego struktury (za pomocą technik krystalograficznych i mikroskopowych) oraz właściwości katalitycznych (za pomocą badań kinetycznych), a następnie opis możliwej ścieżki reakcji metodami teoretycznymi.

W celu produkcji enzymu opracowano system nadeskompresji AcmB w *E. coli* DH5 α wykorzystując system StarGate. Uzyskane białko zostało oczyszczone za pomocą chromatografii powinowactwa Ni-NTA.

W celu wyznaczenia struktury krystalograficznej enzymu istotne jest opracowanie warunków, w których białko krystalizuje. Dlatego zoptymalizowano warunki i skład buforu do krystalizacji białka. Uzyskane pierwsze kryształy nie pozwoliły jednak na uzyskanie rozdzielczości wystarczającej do rozwiązania struktury. Jako alternatywne rozwiązanie do badań krystalograficznych zastosowano modelowanie homologiczne AcmB w oparciu o strukturę KSTD z *Rhodococcus erythropolis*. Model homologiczny został dobrze odwzorowany zarówno w miejscu wiązania kofaktora flawinowego (FAD) jak i w centrum aktywnym. Sekwencja aminokwasowa AcmB posiada jednak o 51 aminokwasów więcej niż sekwencja KSTD. Nadmiarowe reszty częściowo ułożone są w miejscu wiązania substratu co może odpowiadać za szersze spektrum substratowe AcmB niż KSTD. Kolejnym aspektem badań strukturalnych była kwestia spontanicznej agregacji AcmB oraz nieznannej struktury czwartorzędowej enzymu. Problem agregacji badano z zastosowaniem szeregu metod wyznaczających wielkość cząstek (n-PAGE, SEC-HPLC, DLS). Wykazano, że spontaniczna agregacja jest zależna od rozcieńczenia enzymu. Obrazowanie wykonane mikroskopem sił atomowych wskazują na to, że enzym w roztworze występuje w formie monomerycznej, a badania spektrofotometryczne widma enzymu wskazują na hamowanie agregacji poprzez stosowanie czynników redukcyjnych takich jak 2-merkaptoetanol czy ditiotretiol.

Wyznaczono parametry kinetyczne dla progesteronu oraz trzech nowych substratów będących pochodnymi testosteronu. Klasyczne pomiary typu steady-state wykonano metodą zatrzymanego przepływu z zastosowaniem saturacyjnego stężenia 2,6-dichloroindofenolu (DCPIP). Stała szybkości reakcji k_{cat} dla nowych substratów AcmB była tego samego rzędu co k_{cat} progesteronu. Stała Michaelisa K_m dla nowych substratów była o rząd wyższa od K_m progesteronu, co wskazuje na niższe powinowactwo pochodnych testosteronu względem AcmB. Stosując metodę spektrofotometryczną zatrzymanego przepływu zbadano również połówkowe reakcje redukcji i utlenienia flawiny w AcmB. Eksperymenty wykonywano w warunkach beztlenowych z uwagi na re-utleniające działanie tlenu na kofaktor FAD. Wyznaczono stałe redukcji flawiny dla progesteronu i pochodnych testosteronu. Wszystkie stałe redukcji k_{red} były wysokie (150-1100 s⁻¹). Stałe dysocjacji K_d badanych steroidów okazały się być niskie i nie mogły być wyznaczone, co świadczy o bardzo dobrym powinowactwie wszystkich badanych substratów do centrum aktywnego. Pomiar połówkowej reakcji re-utlenienia flawiny wykonano dla DCPIP i tlenu jako akceptorów elektronowych wyznaczając stałe k_{ox} odpowiednio na poziomie 8 i 0.2 s⁻¹. Ten sam rząd wielkości dla wartości k_{cat} i k_{ox} dla DCPIP może świadczyć o tym, że etapem limitującym reakcję jest re-utlenienie flawiny lub oddysocjowanie produktu a nie aktywacja substratu.

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

Projekt badawczy "Opus" NCN 2016/23/B/ST4/02854 [2017-2020]

(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik)

Celem prowadzonych w ramach niniejszego projektu prac doświadczalnych i teoretycznych jest zbadanie natury wanadowych centrów aktywnych, wprowadzonych do matrycy zeolitu BEA o hierarchicznej strukturze mikro- i mezoporowatej, odpowiedzialnych za aktywność katalityczną w utleniającym odwodornieniu (ODH – oxidative dehydrogenation) lekkich alkanów do alkenów oraz określenie mechanizmu procesu ODH zachodzącego na badanych katalizatorach.

Przygotowano dwie serie katalizatorów wanadowych na podstawie matrycy zeolitowej o zmiennej zawartości wanadu w zakresie 0.5-4.0 % wag. Seria I została otrzymana dwustopniową metodą post-syntezy, obejmującą de-aluminację wyjściowego zeolitu BEA, a następnie wprowadzenie jonów wanadowych w powstałe wakacje (próbki te oznaczono jako VxSiBEA). Seria II (VxHAlBEA) została otrzymana poprzez impregnację zeolitu BEA o początkowym module krzemowym Si:Al=17. Rozpoczęto charakterystykę fizyko-chemiczną otrzymanych preparatów celem potwierdzenia ich składu chemicznego i jakościowego opisu aktywnych centrów wanadowych.

W ramach przygotowania do prowadzenia pomiarów katalitycznych zaprojektowano system do pomiarów aktywności katalitycznej w reakcji ODH niższych alkanów. System ten składać się ma z 1) stalowego reaktora przepływowego ze stałym złożem katalizatora, umieszczonego w piecu z elektronicznym sterowaniem temperaturą; 2) układu grzanych rurek stalowych połączonych z masowymi regulatorami przepływu; 3) chromatografu gazowego (GC) wyposażonego w detektory FID i TCD.

Przeanalizowano strukturę krystaliczną niemodyfikowanego zeolitu BEA, a w konsekwencji zaproponowano modele geometryczne opisujące centra wanadowe wprowadzone do zeolitu BEA zarówno w pozycjach sieciowych, jak i jono-wymiennych. Rozpoczęto obliczenia kwantowo-chemiczne zmierzające do opisu struktury elektronowej i geometrycznej możliwych centrów wanadowych oraz określenie ich właściwości.

11. Wpływ przeciwjonów na tworzenie i funkcjonalność membran polielektrolitowych

Projekt badawczy "Opus" NCN 2016/23/B/ST8/03128 [2017-2020]

(kierownik projektu: dr Marta Kolasińska-Sojka)

Celem naukowym projektu jest opracowanie modelu tworzenia filmów polielektrolitowych i nanokompozytowych w obecności wybranych przeciwjonów z szeregu liotropowych – opisanie wpływu jonów z szeregu Hofmeistera na właściwości multiwarstw polielektrolitowych. Mimo, iż prowadzonych jest wiele badań nad różnymi aspektami wielowarstw polielektrolitowych/nanokompozytowych, w literaturze przedmiotu nie ma spójnego opracowania wpływu przeciwjonów (jego rodzaju, pozycji w szeregu liotropowym) na proces osadzania i właściwości filmów polielektrolitowych. Mechanizm, jak przeciwjony z szeregu liotropowego wpływają na tworzenie filmów polielektrolitowych nie jest do końca znany, a zatem w przypadku takich wielowarstw jest to nowość naukowa z wieloma fundamentalnymi problemami, jakie należy rozwiązać. Z tego powodu systematyczne badania właściwości powierzchniowych wybranych układów w obecności wybranych przeciwjonów z szeregu liotropowych są niezbędne by wyjaśnić mechanizm ich wzajemne oddziaływania.

W ramach projektu badany jest wpływ przeciwjonów z szeregu Hofmeistera na tworzenie i strukturę wielowarstwowych filmów polielektrolitowych. Filmy wielowarstwowe są osadzane techniką sekwencyjnej adsorpcji (warstwa po warstwie, LbL) polijonów z ich roztworów. Z zaplanowanych badań dotychczas zrealizowana została optymalizacja tworzenia takich struktur w obecności wybranych elektrolitów. Objęła ona badania kinetyki i efektywności procesu osadzania, przy użyciu mikrowagi kwarcowej, filmów polielektrolitowych: PAH/PSS oraz PDADMAC/PSS w obecności elektrolitu podstawowego KCl w trzech różnych siłach jonowych: $I=0.015M$, $I=0.15M$ oraz $I=1,5M$. Poprzez bezpośrednią analizę profilu siedzącej kropli zbadano zwilżalność i energię powierzchniową otrzymanych filmów polielektrolitowych (nanokompozytowych) w odniesieniu do elektrolitu użytego podczas osadzania. Potwierdzono wpływ siły jonowej na grubości otrzymanych filmów – wraz ze wzrostem siły jonowej rośnie grubość multiwarstw i efekt ten jest dużo wyraźniejszy dla układu PDADMAC/PSS, z powodu przestrzennej budowy PDADMAC, zawierającego w swojej strukturze pierścieni. Zaobserwowano również, iż kinetyka adsorpcji polijonów z roztworów KCl jest szybsza o ok. 30% w porównaniu do osadzania z roztworów NaCl. Natomiast badania zwilżalności potwierdziły bardziej hydrofobowy charakter filmów zakończonych warstwą polikationową w porównaniu z multiwarstwami z ostatnią warstwą polianionową.

Głównym i wymiernym efektem projektu będzie opracowanie modelu tworzenia filmów polielektrolitowych i nanokompozytowych w obecności wybranych przeciwjonów z szeregu liotropowego. Podstawowa wiedza i zebrane doświadczenie pomogą zrozumieć mechanizmy odpowiedzialne za tworzenie takich struktur, a tym samym umożliwią projektowanie materiałów o ściśle określonych właściwościach. Pomogą one również zrozumieć, jak funkcjonalność PEM zależy od rodzaju zastosowanych przeciwjonów. Będzie to niezmiernie ważne w dalszych badaniach, prowadzących do wdrożenia uzyskanych wyników w zakresie selektywnych membran, biomateriałów i nanokontenerów, wnosząc do nich bardzo istotny wkład. Jest to niezwykle ważne z praktycznego punktu widzenia, ponieważ zwiększy możliwości projektowania biomateriałów oraz selektywnych membran, uwzględniających pożądane właściwości fizykochemicznych i ich specyficzne zastosowania.

12. Dendrymery jako platforma do projektowania biologicznie czynnych nośników

Projekt badawczy "Opus" NCN ST5/ 02788 [2017-20]

(kierownik projektu: dr hab. inż. Barbara Jachimska)

Dendrymery stanowią syntetyczne makrocząsteczek o interesujących właściwościach, takich jak hiperrozgałęziona struktura, kulisty kształt, dobrze zdefiniowane rozmiary i ciężar cząsteczkowy, określona liczba grup funkcyjnych i względnie niepolarne przestrzenie wewnętrzne. Dendrymery wykazują istotnie nowe i odrębne fizyczne, chemiczne czy też biologiczne właściwości i funkcje w porównaniu do tradycyjnych polimerów liniowych.

Głównym celem projektu jest stworzenie podstaw naukowych dla zrozumienia mechanizmu adsorpcji białek na powierzchni nanośników opartych na strukturach dendrymerowych oraz opracowanie metodologii otrzymywania stabilnych struktur hybrydowych o odpowiedniej funkcjonalności w sposób kontrolowany, które mogą być wykorzystane jako nośniki leków, materiały do testów immunologicznych czy materiały teranostyczne. Prowadzenie badań wielotorowo z zastosowaniem zaawansowanych technik pomiarowych *in situ* pozwala wielopłaszczyznowo śledzić proces tworzenia struktur hybrydowych. Określenie mechanizmów oddziaływania materiałów funkcjonalnych z różnego typu białkami występującymi w osoczu wraz z analizą zmian konformacji oraz reorganizacji struktur białkowych na powierzchniach funkcjonalnych ma istotne znaczenie poznawcze. Zaplanowane badania mają na celu rozwinięcie bezpośrednich metod umożliwiających pomiar kinetyki adsorpcji białek wchodzących w skład osocza na powierzchni nanośnika dendrymerowego typu PAMAM oraz określenie optymalnych warunków tworzenia kompleksu dendrymerowego zawierającego aktywny czynnik terapeutyczny.

Proponowany projekt badawczy sięga w zupełnie innowacyjny obszar metodologii badawczej umożliwiając rozwój nowatorskiej metodologii syntezy struktur molekularnych, co jest ściśle związane z tworzeniem zaawansowanych materiałów funkcjonalnych.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "PRELUDIUM"

1. Filmy polielektrolitowo-lipidowe z wbudowanymi hydrofobowymi nanocząstkami

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2015/19/N/ST4/00917 [2016-2017]
(doktorant: mgr Magdalena Włodek, promotor: prof. Piotr Warszyński)

Celem naukowym projektu było opracowanie mechanizmu tworzenia filmów polielektrolitowo-lipidowych z wbudowanymi hydrofobowymi nanocząstkami. Jako nanocząstki wybrano hydrofobowe kropki kwantowe wykonane z siarczku kadmu CdS w zakresie emisji (400-460nm).

W tegorocznych pracach badawczych, zbadano adsorpcję liposomów z zamkniętymi hydrofobowymi kropkami kwantowymi na wybranych filmach polielektrolitowych przy użyciu mikrowagi kwarcowej z kontrolowaną dyssypacją (QCM-D). Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe otrzymywano z zastosowaniem metody *layer by layer* (LBL) opierającej się na sekwencyjnej adsorpcji przeciwnie naładowanych polijonów na płaskich powierzchniach modelowych np. złoto, krzem/krzemionka, mika. Badania przeprowadzono dla czterech układów o różnych składach polielektrolitów: PEI, PEI(PGA/PLL)₃, PEI(PSS/PDADMAC)₃ oraz PEI(PSS/PEI)₃. Otrzymane wyniki wykazały iż obecność nanocząstek powoduje, we wszystkich badanych przypadkach, rozluźnienie błony lipidowej, co skutkuje obniżeniem krytycznego stężenia liposomów niezbędnego do zainicjowania tworzenia zaadsorbowanej dwuwarstwy lipidowej. W zależności od analizowanego układu obecność kropek kwantowych sprzyja tworzeniu dwuwarstw lipidowych (filmy zakończone warstwą PEI bądź PDADMAC) lub stabilizacji liposomów z zamkniętymi kropkami kwantowymi na multiwarstwach zakończonych PLL.

Następnie dokonano pełnej charakterystyki otrzymanych filmów polielektrolitowo-lipidowych z wbudowanymi hydrofobowymi kropkami kwantowymi. Wykonane fluorescencyjne widma emisyjne, potwierdziły obecność hydrofobowych nanocząstek w strukturze takich multiwarstw. Z kolei, za pomocą mikroskopii sił atomowych (AFM), zaobserwowano, iż inkorporacja hydrofobowych kropek kwantowych powoduje zaburzenia/zakłócenia w strukturze dwuwarstw lipidowych w postaci dziur. Efekt ten wzrasta ze wzrostem wielkości nanocząstek.

Zgromadzona podstawowa wiedza oraz otrzymane wyniki, pozwoliły, z jednej strony, określić wpływ oddziaływań występujących pomiędzy nanocząstkami a hydrofobowymi łańcuchami lipidów na stabilność liposomów, a z drugiej strony znajomość tych parametrów da podstawy do umiejętnego sterowania zachowaniem liposomów na powierzchni multiwarstw.

2. Synteza biopolimerowych nanocząstek hybrydowych

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2016/23/N/ST5/02783 [2017-2019]

(doktorant: mgr Marta Szczęch, (promotor prof. Piotr Warszyński)

Nanocząstki hybrydowe (wielofunkcyjne) cieszą się dużym zainteresowaniem ze względu na ich ogromny potencjał aplikacyjny, który z powodzeniem znajduje zastosowanie w dynamicznie rozwijającej się nanomedycynie. Do tego typu nanoukładów zaliczają się nanocząstki teranostyczne, a ich wielofunkcyjność polega na jednoczesnym dostarczaniu czynnika terapeutycznego (leku) oraz czynnika diagnostycznego, pozwalającego na śledzenie wędrówki nanonośnika w organizmie. Wielofunkcyjność jest ogromną zaletą wspomnianych nanonośników, jednak jest jeszcze wiele przeszkód, które należy pokonać aby skutecznie ich działanie w testach klinicznych np. poprzez zwiększenie efektywności dostarczania układów hybrydowych, czy też inkorporacji efektywnej ilości czynnika diagnostycznego.

Celem projektu jest rozwinięcie podstaw naukowych i zgromadzenie niezbędnej wiedzy związanej z opracowaniem metodologii syntezy biokompatybilnych i biodegradowalnych nanocząstek hybrydowych, dla substancji hydrofobowych, optymalizacja stężenia wbudowanych nanocząstek magnetycznych (tlenków żelaza), fizykochemiczna charakterystyka zsyntezowanych nanonośników hybrydowych, funkcjonalizacja ich właściwości powierzchniowych, jak również przeprowadzenie wstępnych testów biologicznych.

W 2017 roku skupiliśmy się na syntezie biopolimerowych nanocząstek z wbudowanym czynnikiem diagnostycznym. Do syntezy wykorzystaliśmy metodę emulsyfikacji techniką odwróconych faz (ang. Phase Inversion Composition, PIC). Nanocząstki utworzone zostały z biokompatybilnego i biodegradowalnego polimeru (polikaportlakton, PCL), z kolei jako czynnik diagnostyczny użyto tlenek żelaza (Fe_3O_4). Przeprowadziliśmy optymalizację enkapsulacji nanocząstek Fe_3O_4 wbudowanych w rdzeń nanonośnika polimerowego, pozwoliło to na otrzymanie nośników o średnim rozmiarze 80nm, z 40%-ową zawartością nanocząstek. Uzyskane wyniki stanowią podstawę do kontynuacji badań w celu ich zastosowania, jako funkcjonalnych nanonośników hybrydowych.

3. Funkcjonalne hybrydowe nanomateriały na bazie dendrymerów poli(amidoaminowych) PAMAM

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2016/23/N/ST4/02532 [2017-2019]

(doktorant: mgr Karolina Tokarczyk, promotor: dr hab. Barbara Jachimska)

Celem projektu jest poznanie roli dendrymerów poli(amidoaminowych) (PAMAM) jako nanośników leków przeciwnowotworowych i zbadanie mechanizmu oddziaływania utworzonych kompleksów z białkami osocza krwi. Dzięki swojej unikalnej, wysoce rozgałęzionej strukturze i właściwościom fizykochemicznym, dendrymery stały się szeroko stosowaną grupą polimerów sferycznych, obecnie intensywnie badaną pod względem zastosowań biomedycznych. Związki mają działanie antybakteryjne, antygrzybiczne i antywirusowe, a także jako nośniki farmakologiczne. Mają możliwość transportu substancji, zarówno poprzez wiązanie jej z grupami powierzchniowymi, jak i w wolnych przestrzeniach we wnętrzu polimeru. Problemy dzisiejszej biomedycyny, związane z właściwościami stosowanych terapeutyków, takie jak: ich słaba rozpuszczalność w środowisku wodnym, wysoka toksyczność, czy też poważne efekty uboczne wymagają ciągłego poszukiwania efektywnych i stabilnych mechanizmów terapeutycznych. Rozwiązaniem problemu może okazać się zaprojektowanie odpowiednich nanohybrydowych układów transportowych dla danych leków. Nośniki substancji czynnych zwiększą ich efektywność działania, zmniejszą skutki uboczne i mogą stać się podstawą biomedycyny.

Metodologia zakłada poznanie sposobu wiązania i uwalniania przez dendrymery poli(amidoaminowych) (PAMAM) cząsteczek leku przeciwnowotworowego. Badania dotyczą mechanizmu działania układów hybrydowych na poziomie molekularnym. W projekcie stosujemy precyzyjne techniki analityczne, takie jak wieloparametrowy powierzchniowy rezonans plazmonów (MP-SPR), mikrowaga kwarcowa z monitorowaną dyssypacją energii (QCM-D) do analizy właściwości otrzymanych układów. Badania przeprowadzono zarówno w roztworze, jak i na powierzchni, w ściśle określonych i kontrolowanych warunkach pH, siły jonowej i stężenia.

Wyniki, otrzymane w ramach tego projektu badawczego, wzbogacą podstawową wiedzę na temat mechanizmów formowania kompleksów na bazie dendrymerów PAMAM. Zwiększą możliwości projektowania układów nanohybrydowych pod kątem wymaganych właściwości fizykochemicznych. Poszerzenie wiedzy na temat oddziaływania dendrymerów z białkami osocza krwi oraz substancjami aktywnymi przyczyni się do dalszych, bardziej zaawansowanych badań, zwłaszcza w aspekcie zastosowania dendrymerów jako inteligentnych nośników farmakologicznych.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "FUGA"

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

Projekt badawczy "Fuga" NCN 2015/16/S/ST3/00450 [2015-2018]

(stażysta :*dr Piotr Mazalski*, opiekun stażu: *dr hab. Nika Spiridis prof. IKiFP PAN*)

W ramach realizacji zadań projektu prowadzone były dalsze badania ultracienkich warstw kobaltu otoczonych różnymi kombinacjami ultracienkich warstw niemagnetycznych, tj. $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Co}/\text{Pt}$, $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Co}/\text{Au}$, $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Au}/\text{Co}/\text{Pt}$, $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Au}/\text{Co}/\text{Au}$. Grubość warstw Co wynosiła $d_{\text{Co}}=3$ nm. Dla tej grubości namagnesowanie jest w płaszczyźnie warstwy. Dla próbek reprezentujących każdą z kombinacji warstw naświetlanie różnymi dozami jonów wykonane zostało na obszarach przylegających do siebie pasków (milimetrowej szerokości). Na podstawie tych badań wybrane zostały parametry naświetlania najbardziej interesujące pod względem indukowanych zmian właściwości magnetycznych i dla nich wykonano próbki naświetlane na całej powierzchni. Otrzymane wyniki z pomiarów magnetoptycznych na wykonanych próbkach były podobne do tych otrzymanych z próbek z dwoma gradientami (gradient grubości Co i dozy naświetlania) - możliwość indukowania kilku sekwencji pojawiania się prostopadłej anizotropii magnetycznej w zależności od dozy i warstwy przykrywającej/buforowej. Na próbkach w postaci pasków wykonane zostały pomiary spektroskopii magnetoptycznej, natomiast dla próbek naświetlonych na całej powierzchni pomiary rozpraszania rentgenowskiego (XRR) i rentgenowskiej spektroskopii fotoelektronów (XPS). Na podstawie zmierzonych widm zostały zaproponowane modele wewnętrznej struktury warstw po naświetleniu jonami. Pomiary rozpraszania rentgenowskiego pozwoliły prześledzić zmiany szorstkości i grubości warstw w naświetlonych ultracienkich warstwach. Z analizy wynika, że układy zawierające złoto mają większą szorstkość i są bardziej podatne na efekt trawienia – usuwania materiału – podczas naświetlania. Na podstawie pomiarów spektroskopii rentgenowskiej przeprowadzono charakteryzację składu chemicznego pod kątem zawartości procentowej stopów tworzących się w warstwach.

Oprócz ultracienkich warstw kobaltu wytworzone zostały również ultracienkie warstwy żelaza ($\text{Pt}/\text{Fe}/\text{Pt}$), które również naświetlono jonami. Pierwsze badania magnetoptyczne wykazały, że efekt indukowania zmian właściwości magnetycznych jest słabszy w porównaniu do ultracienkich warstw kobaltu.

Wykonane zostały również wstępne naświetlania z wykorzystaniem skupionej wiązki jonów (FIB) w postaci kwadratów o rozmiarach mikrometrów. Dzięki takiemu naświetlaniu możliwa jest lokalna zmiana właściwości magnetycznych i indukowanie ciekawych zmian właściwości magnetycznych zależnych od rozmiarów naświetlanych obszarów.

Prowadzono również prace dotyczące rozbudowy systemu UHV o dodatkową komorę Kerr'a, dzięki której możliwe będą pomiary właściwości magnetycznych in-situ, a także prace związane z testowaniem komory XAS i mikroskopu PEEM w synchrotronie Solaris.

2. Wpływ promieniowania elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni na oddziaływania białek z powierzchniami stałymi

Projekt badawczy "Fuga" NCN 2015/16/S/ST4/00465 [2015-2018]

(stażystka: dr Magdalena Kowacz, opiekun naukowy: prof. Piotr Warszyński)

Adsorpcja białek na powierzchni stałej wpływa zarówno na właściwości powierzchni (np. jej biokompatybilność), jak i funkcjonowanie samego białka. Zdolność białka do zachowania biologicznej aktywności uzależniona jest od charakteru grup odpowiedzialnych za kontakt z powierzchnią, struktury oraz względnej plastyczności zaadsorbowanego białka. Cechy te decydują o możliwości specyficznych fluktuacji struktury białka, które są niezbędne dla wypełniania odpowiednich funkcji biologicznych. Strukturalne fluktuacje są możliwe jedynie przy odpowiednim poziomie uwodnienia. Warstwa hydratacyjna ułatwia również mobilność grup funkcyjnych w kontakcie z powierzchnią. W tym projekcie badamy zdolność promieniowania elektromagnetycznego w podczerwieni (IR) do modyfikowania oddziaływań białko-powierzchnia.

Uzyskane wyniki wskazują, że promieniowanie podczerwone chroni białka przed procesem denaturacji podczas procesu adsorpcji (Rysunek 1). Efekt ochronny uzależniony jest od obecności na powierzchni białka silnie uwodnionych grup funkcyjnych. Zachowanie specyficznej struktury sugeruje, że unieruchomione białko może wciąż wykazywać swoją biologiczną aktywność. Inne doniesienia naukowe pokazały również, że stabilizacja struktury białka chroni je przed procesem nieodwracalnej adsorpcji. Poza tym struktura białkowej warstwy adsorpcyjnej definiuje zwilżalność powierzchni, a powstrzymanie procesu denaturacji skutkuje pokryciem o większym powinowactwie do wody. W przypadku nanocząstek takie pokrycie przeciwdziała ich wzajemnej agregacji dzięki obecności rozbudowanej warstwy hydratacyjnej. Z drugiej strony, IR ułatwia również desorpcję jonów niespecyficznie związanych z hydrofobową powierzchnią białka. Obecność zaadsorbowanych jonów zmniejsza napięcie powierzchniowe między wodą a niepolarnymi częściami białka eksponowanymi do roztworu, niemniej jednak może również przyczyniać się do denaturacji. Indukowana przez IR desorpcja jonów sprzyja zachowaniu struktury, ale również zwiększeniu napięcia powierzchniowego. Ten ostatni efekt może skutkować agregacją nanocząstek w wyniku oddziaływań hydrofobowych między tworzącymi ich pokrycie białkami. Nasze badania sugerują, że usunięcie zaadsorbowanych jonów odbywa się za pośrednictwem gazowych nanodomien indukowanych lub adsorbowanych na powierzchniach niepolarnych w wyniku oddziaływania IR. Wypadkowy wpływ IR na oddziaływania białko-białko oraz białko-powierzchnia, definiowany przez oddziaływania hydrofobowe i siły hydratacyjne, zależy od względnego udziału niepolarnych oraz silnie uwodnionych domen na powierzchni białka.



Rysunek 1. Schematyczny rysunek ilustrujący ochronny efekt IR na strukturę białka podczas procesu adsorpcji na powierzchni stałej.

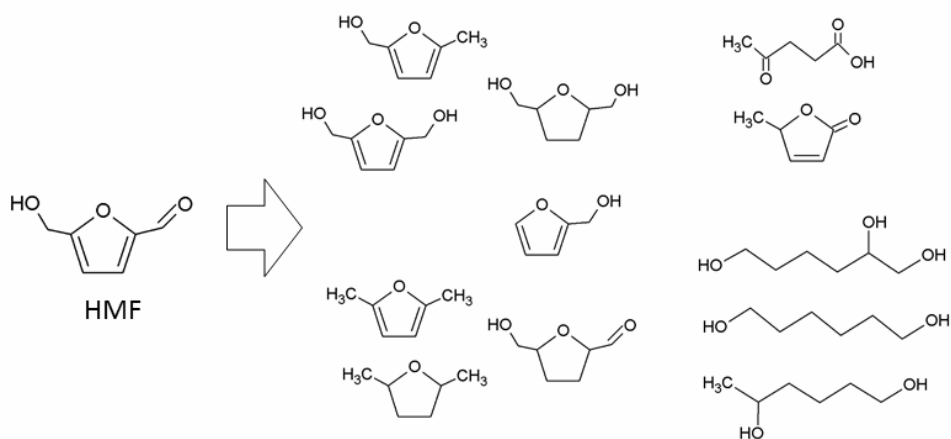
PROJEKTY BADAWCZE NCN "MINIATURA"

1. Rola wodorowych brązów molibdenowych i wolframowych w uwodornieniu biosuwrowca 5-(hydroksymetylo)furfuralu na katalizatorach Pd/MoO₃ i Pd/WO₃

Projekt badawczy "Miniatura" NCN 2017/01/X/ST4/00731 [2017-2018]

(kierownik projektu: dr Robert Kosydar)

Katalityczna transformacja 5-hydroksymetylofurfuralu (HMF) jest jednym z najaktualniejszych zagadnień badawczych z uwagi na potrzebę zastąpienia surowców kopalnych (ropa naftowa) innym źródłem reagentów organicznych koniecznych do produkcji paliw, związków chemicznych, polimerów. Proponowane jest zastosowanie 5-hydroksymetylofurfuralu pochodzącego z konwersji odnawialnej biomasy celulozowej (odpadów roślinnych). HMF stanowi przyszłościowy substrat do otrzymywania szeregu związków chemicznych (Schemat 1), np. biopaliw, między innymi na drodze katalitycznego uwodornienia. W rozpoczętym projekcie badane jest zastosowanie w tej reakcji katalizatorów palladowych na nośnikach MoO₃ lub WO₃. Aktywacja H₂ na centrach Pd skutkuje utworzeniem wodoru H, który w procesie „spillover” migruje do sieci nośnika tworząc brązy wodorowe H_xMoO₃ lub H_xWO₃, co może wpływać na aktywność/selektywność tych katalizatorów. Celem projektu jest określenie roli takich układów katalitycznych podczas uwodornienia HMF w fazie ciekłej w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury. W okresie od października (uruchomienie finansowania 20.10.2017) do grudnia 2017 wykonano analizę najnowszego stanu literatury naukowej dotyczącej opisanego wyżej problemu badawczego, rozpoczęto zakupy odczynników (HMF i możliwych produktów reakcji) niezbędnych do realizacji pomiarów katalitycznych i kalibracyjnych. Przeprowadzono pomiary przy zastosowaniu chromatografii gazowej GC-FID i zakupionych „standardów” celem stworzenia krzywych kalibracyjnych dla poszczególnych produktów uwodornienia.



Schemat 1. Wybrane produkty 5-hydroksymetylofurfuralu (HMF) w reakcjach z udziałem wodoru.

2. Stabilizacja aktywności katalitycznej dehydrogenazy 1-(*R*)-fenyloetanolowej poprzez immobilizację na polilizynie

Projekt badawczy "Miniatura" NCN 2017/01/X/ST5/00735 [2017-2018]

(kierownik projektu: dr inż. Mateusz Tataruch)

Dehydrogenaza 1-(*R*)-fenyloetanolowa (*R*-PEDH) jest enzymem pochodzącym z bakterii *A. aromaticum*, który redukuje ze 100-procentową stereoselektywnością acetofenon do (*R*)-1-fenyloetanolu. Biokatalizator ten może katalizować redukcje także innych ketonów produktem czego są formy *R* aromatycznych alkoholi mogące stanowić syntony substancji czynnych w lekach.

Prace badawcze przewidziane w projekcie mają na celu wytworzenie immobilizowanej formacji enzymu dehydrogenazy 1-(*R*)-fenyloetanolowej na rozpuszczalnym w wodzie polipeptydzie – polilizynie przy wykorzystaniu wiązania bis-aryl-hydrazonowego. Immobilizacja enzymów wiąże się ze zwiększeniem ich stabilności w warunkach reaktorowych. W przypadku *R*-PEDH nie odnotowano dotąd żadnych doniesień literaturowych na temat prób immobilizacji tego enzymu. Najprawdopodobniej jedynymi prowadzonymi aktualnie w tej dziedzinie pracami są prowadzone w IKiFP PAN badania nad unieruchomieniem *R*-PEDH na nośnikach stałych, głównie krzemionkowych z zastosowaniem klasycznych linkerów jak aldehyd glutarowy czy diwinylosulfon.

Grant rozpoczął się finansowo dnia 20.10.2017 roku. Działania badawcze przewidziane w granie rozpoczyna etap hodowli bakteryjnej szczepu *Escherichia coli* z genem odpowiedzialnym za ekspresję *R*-PEDH oraz etap izolacji enzymu przy zastosowaniu chromatografii powinowactwa typu Strep-Tag. W ramach projektu wykonana została pilotażowa hodowla bakteryjna na 4 litrach pożywki LB. W wyniku hodowli pozyskano 50 ml lizatu bakteryjnego, którego aktywność enzymatyczna została potwierdzona w teście spektrofotometrycznym w reakcji z acetofenonem.

PROJEKTY BADAWCZE MNiSW "IUVENTUS PLUS"

1. Określenie wpływu właściwości powierzchniowych nanocząstek srebra na ich aktywność cytotoksyczną wobec wybranych komórek ludzkiego układu immunologicznego oraz komórek tkanki łącznej właściwej

Projekt badawczy „Juventus Plus” MNiSW IP 2015 055974 [2016-2019]

(kierownik projektu: dr Magdalena Oćwieja)

Ostatnie doniesienia literaturowe wskazują, że w dziedzinie badań dotyczących nanocząstek srebra, szczególna uwaga naukowców skupia się na reakcjach i procesach chemicznych zachodzących na ich powierzchniach, które w znacznej mierze mogą przyczyniać się do indukowania aktywności biologicznej. Ładunek powierzchniowy oraz stopień utlenienia nanocząstek srebra silnie zależą od struktury chemicznej i właściwości stabilizatorów zaadsorbowanych na ich powierzchniach, dlatego też wpływ tych związków wydaje się mieć kluczowe znaczenie dla oceny toksyczności nanocząstek. Mając na uwadze te zagadnienia, celem prac badawczych realizowanych w ramach projektu było określenie cytotoksyczności trzech typów nanocząstek srebra, charakteryzujących się zbliżonym kształtem oraz wielkością, wobec komórek ludzkiej ostrej białaczki promielocytowej (HL-60) oraz monoblastycznej (U-937).

Nanocząstki srebra zostały otrzymane metodą redukcji chemicznej przy użyciu azotanu(V) srebra jako prekursora jonów srebra oraz borowodoru sodu jako reduktora. Ładunek powierzchniowy nanocząstek modelowano za pomocą dodatku cytrynianu trisodu lub chlorowodoru cysteaminy. Wybrane właściwości fizykochemiczne nanocząstek srebra badano za pomocą techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS), pomiarów ruchliwości elektroforetycznej, transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM), powierzchniowo wzmocnionej spektroskopii Ramana (SERS) oraz atomowej spektrometrii absorpcyjnej (AAS). Wpływ nanocząstek srebra na żywotność komórek U-937 oraz HL-60 oceniano przy użyciu badań określających aktywność mitochondriów (test MTT) oraz stopień uszkodzenia błony plazmatycznej (test LDH). Pomiary sekrecji tlenku azotu (NO) oraz interleukiny-6 (IL-6) zostały użyte do określenia stopnia indukcji stanu zapalnego w badanych komórkach pod wpływem traktowania nanocząstkami srebra. Stres oksydacyjny indukowany w komórkach na skutek działania nanocząstek srebra oceniono przez badania peroksydacji lipidów błonowych. Dodatkowo zbadano również zmiany w aktywności dysmutazy ponadtlenkowej (SOD) oraz całkowitej aktywności antyoksydacyjnej komórek po traktowaniu nanocząstkami srebra o zróżnicowanym stężeniu.

Wyniki badań pokazały, że dodatnio naładowane nanocząstki srebra stabilizowane za pomocą cysteaminy (SBATE) były najmniej toksyczne dla badanych komórek pomimo, że charakteryzowały się profilem uwalniania jonów srebra zbliżonym do niemodyfikowanych, ujemnie naładowanych nanocząstek otrzymanych jedynie przy użyciu borowodoru sodu (SBNM). Ujemnie naładowane nanocząstki srebra stabilizowane za pomocą cytrynianu trisodu (SBTC) indukowały aktywność dysmutazy ponadtlenkowej w komórkach HL-60. Pod wpływem nanocząstek SBTC zaobserwowano również wzrost całkowitej aktywności antyoksydacyjnej w komórkach U-937 chociaż nanocząstki te były najbardziej odporne na procesy utleniającego roztwarzania. Nanocząstki SBNM wykazywały najsilniejszą toksyczność wobec badanych komórek. Działanie nanocząstek SBTC przejawiało się głównie w uszkodzeniach błon biologicznych komórek, spadku aktywności mitochondriów oraz silnej indukcji stanu zapalnego objawiającej się we wzroście stężenia NO oraz IL-6.

Wyniki przeprowadzonych badań jednoznacznie pokazały, że nanocząstki srebra niezależnie od ich właściwości fizykochemicznych wykazują wielokierunkowe działanie wobec testowanych komórek rakowych. Ponadto, uzyskane dane dowodzą, że cytotoksyczność nanocząstek srebra jest ściśle związana z ich ładunkiem powierzchniowym, profilem uwalniania jonów srebra oraz właściwościami cząsteczek stabilizatorów zaadsorbowanych na ich powierzchni.

PROJEKTY BADAŃ STOSOWANYCH NCBiR

1. HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych



Program Badań Stosowanych NCBiR HERIVERDE PBS2/A9/24/2013
[2013-2017] wspólnie z Muzeum Narodowym w Krakowie
(kierownik projektu: prof. Roman Kozłowski)

W końcowym etapie projektu opracowano schemat wyboru strategii zarządzania klimatem w instytucjach przechowujących zasoby dziedzictwa obejmujący analizę budynku, analizę istniejących warunków mikroklimatycznych, oraz analizę scenariuszy kontroli klimatu i zużycia energii. Prace oparto o dwa studia przypadku: Galerię Sztuki Polskiej XIX wieku w Sukiennicach, oddział Muzeum Narodowego w Krakowie jako obiekt w pełni klimatyzowany oraz budynek pałacu Krasieńskich, należący do Biblioteki Narodowej w Warszawie jako obiekt nieklimatyzowany. Przeanalizowano warunki mikroklimatyczne istniejące w obydwu budynkach oraz określono dotychczasowe klasy kontroli klimatu odnosząc się do obowiązujących w placówkach norm i innych wytycznych międzynarodowych. Do analizy danych zastosowano opracowane w ramach projektu oprogramowanie HERIE służące ilościowej ocenie fizycznego zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania mikroklimatu.

Następnie przyjęto alternatywne scenariusze kontroli klimatu i zużycia energii w oparciu o analizę wpływu tych scenariuszy na zachowanie zabytkowego charakteru budynku, opłacalność ekonomiczną, szczególnie oszczędności wynikające z podniesienia efektywności energetycznej, oraz na mikroklimat dostosowany do funkcji poszczególnych pomieszczeń.

W przypadku Sukiennic przyjęto dwa scenariusze generalne - zachowanie pełnej klimatyzacji Galerii oraz rezygnację z tej klimatyzacji i nawilżanie oraz osuszanie przestrzeni za pomocą niewielkich urządzeń mobilnych. W scenariuszu pełnej klimatyzacji poddano analizie trzy algorytmy regulacji warunków klimatycznych: ścisłej kontroli (kategoria AA Amerykańskiego Stowarzyszenia Inżynierów Ogrzewnictwa, Chłodnictwa i Klimatyzacji ASHRAE), ostrożnej kontroli (wytyczne środowiskowe zawarte w deklaracji Komitetu Konserwacji Międzynarodowej Rady Muzeów ICOM i Międzynarodowego Instytutu Konserwacji IIC z 2014 roku), oraz wytyczne własne Muzeum Narodowego w Krakowie przewidujące spadek wilgotności względnej do 35% w warunkach zimowych.

W przypadku pałacu Krasieńskich przeanalizowano trzy scenariusze regulacji warunków klimatu, wszystkie bez instalacji urządzeń do wentylacji mechanicznej lub pełnej klimatyzacji powietrza niemożliwej ze względu na wysoką wartość zabytkową budynku: staranną regulację temperatury - z wyodrębnieniem strefy pomieszczeń magazynowych oraz pomieszczeń do pracy, pasywną stabilizację mikroklimatu w pomieszczeniach magazynowych - dopuszczającą powolny spadek temperatury w okresie chłodnym, oraz pasywną stabilizację mikroklimatu w pomieszczeniach magazynowych z dodatkową funkcją osuszania powietrza, tak aby wilgotność względna nie przekraczała 50%.

Wyniki pomiarów i modelowania całkowitego zużycia energii w przeliczeniu na 1 m³ kubatury sal wystawowych w Galerii Sztuki Polskiej XIX wieku w Sukiennicach pokazały, że wprowadzenie przemyślanej klimatyzacji ograniczonej do sal wystawowych oraz opartej na minimalnym udziale powietrza zewnętrznego nie musi skutkować zwiększeniem zużycia energii w stosunku do pomieszczeń nieklimatyzowanych. Z kolei w pałacu Krasieńskich skuteczną ochronę zbiorów może zapewnić energooszczędna strategia „zrównoważonej konserwacji”, budząca rosnące zainteresowanie środowisk muzealnych i konserwatorskich na świecie. Zaleca ona regulację warunków klimatu bez instalowania urządzeń klimatyzacyjnych, a przy stosowaniu metod pasywnych i prostych technik łatwych w utrzymaniu.

PROJEKTY NCBiR "LIDER"

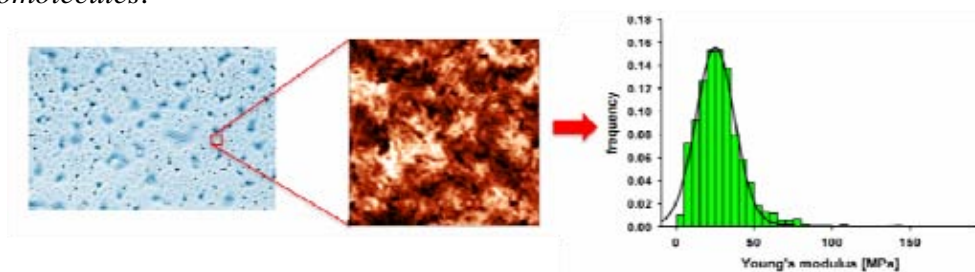
1. Nowe sfunkcjonalizowane biopolimery do zastosowań medycznych.

Projekt badawczy "Lider" NCBiR Lider 0090/L-7/2015 [2017-2019]

(kierownik projektu: dr Maciej Guzik)

Etap 1: Przygotowanie polimeru polihydroksyoktanianu (PHO)

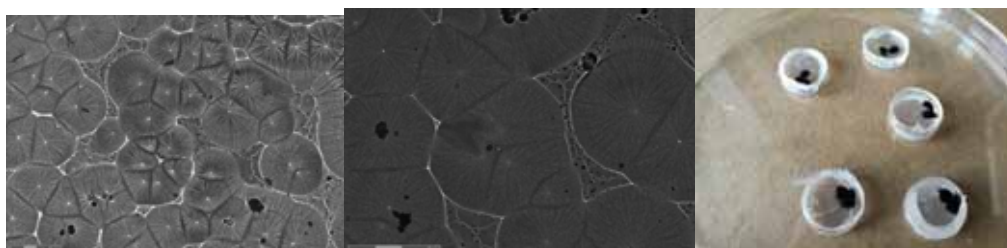
Etap ten obejmuje produkcję polimerów pochodzenia bakteryjnego polihydroksyoktanianu (PHO). Wyprodukowano minimalne ilości polimeru PHO potrzebnego do badań wstępnych przy pomocy szczepu *Pseudomonas putida* KT2440 w fermentorze 5L (160g CDW; 60% PHO). Polimer oczyszczono na węglu aktywnym w celu pozbycia się zanieczyszczeń (lipopolisacharyd, kolor). Polimer poddano dogłębnej charakteryzacji fizykochemicznej – wykonano analizy DMA ($t_g = -28,5^\circ\text{C}$), DTG ($t_{deg} = 269,3^\circ\text{C}$), PALS ($t_3 = 2.818$ ns; $I_3 = 29\%$, $R = 0,35$ nm; $V = 179$ Å³), XRD ($X_c \sim 37\%$), GC (pow. 99 mol% 3-hydroksyoktanian). Polimer poddano badaniom mikroskopowym – wykorzystano mikroskopię w świetle spolaryzowanym, spektroskopię sił oraz mikroskopię sił atomowych. Określono lokalne moduły Younga (średnio 25.4 MPa) oraz szorstkość powierzchni polimeru wylanego z octanu etylu (2.6–86.8 nm dla powierzchni 1–900 μm²), acetonu oraz chloroformu, jako rozpuszczalników. Wyniki zebrano w publikację, która obecnie jest oceniana w *Biomacromolecules*.



Rysunek 1. Charakterystyka powierzchni PHO. Od lewej do prawej: Obraz powierzchni w świetle spolaryzowanym, Obrazowanie AFM; wyznaczone moduły Younga.

Etap 2: Badania wstępne pod hodowle komórkowe i mikrobiologiczne

Sprawdzono własności optyczne badanego materiału. Wykalibrowano układu pomiarowy (mikroskop konfokalny) w celu wykonania obrazowania z możliwie wysoką jakością i rozdzielczością. Opracowano protokoły barwienia badanego materiału celem obserwacji w technice mikroskopii konfokalnej. Przeprowadzono próbne barwienia próbek oraz określenie optymalnego stężenia barwnika (fluoresceina) potrzebnego dla uzyskania obrazów o optymalnej jakości i rozdzielczości. Opracowano protokoły wylewania podłoży wykonanych z PHO na potrzeby hodowli komórkowych. Wybrano metody i przygotowanie materiałów do wykonania testów cytotoksyczności materiału. Wykonano testy cytotoksyczności komórek MEF na podłożach szklanych. Przygotowano próbki PHO do badań mikroindentacji. Wykonano wstępne badania mikrobiologiczne: określono produkcję zewnątrzkomórkowego śluzu przez grzyby drożdżopodobne z rodzaju *Candida* spp. Wykonano test oceny morfologii kolonii na podłożu Congo Red Agar i wyselekcjonowano izolaty do dalszych badań nad adhezją i biofilmem mieszanym.



Rysunek 2. Powierzchnia PHA wylanego na szklanym podłożu przy zastosowaniu zmodyfikowanej metody suszenia materiału z osłoną ograniczającą parowanie rozpuszczalnika oraz próbki PHA w różnym stadium krystalizacji 3,7,12,14,17 dni przygotowane do badań indentacyjnych.

PROJEKTY FNP "HOMING"

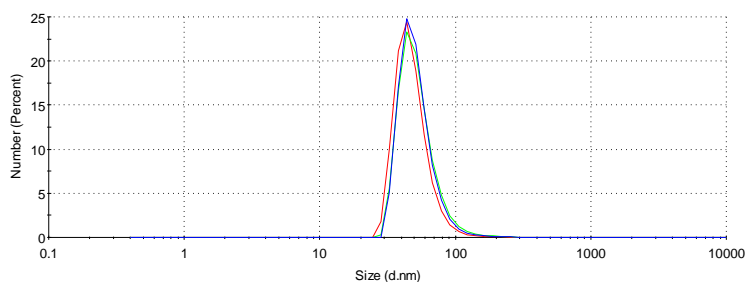
1. Rozwinięcie metodologii syntezy i stabilizacji nanocząstek metali w celu otrzymania materiałów przewodzących

Projekt badawczy "Homing" FNP Homing/2017-3/28 [2017-2019]
(kierownik projektu: dr Anna Pajor-Świerzy)

W ostatnich latach nanocząstki (NPs) metali jako komponenty przewodzących tuszy i past przyciągały wiele uwagi ze względu na ich potencjalne zastosowanie w przemyśle elektronicznym. Nanocząsteczki srebra, ze względu na ich wysokie przewodnictwo i stabilność odnośnie utleniania, były dotychczas najczęściej stosowane do wytwarzania obwodów i urządzeń elektronicznych. Pomimo, iż Ag NPs posiadają oczywiste zalety, ich wysoka cena ogranicza ich wykorzystanie na szeroką skalę przemysłową. Cyna i nikiel, wykazujące dobre przewodnictwo elektryczne oraz nie wymagające dużych nakładów finansowych, zaliczane są do metali, które z powodzeniem mogą zastąpić srebro. Jednak nanocząstki Sn i Ni ulegają utlenieniu w powietrzu, co powoduje obniżenie ich przewodnictwa. Jedną z opcji, która umożliwia zarówno przezwyciężyć wysokie koszty związane z zastosowaniem srebra jak i zapobiec spontanicznemu utlenianiu nanocząstek niklu i cyny, jest utworzenie cząstek typu „core-shell” („rdzeń-powłoka”).

Głównym celem projektu „Homing” jest opracowanie metody syntezy stabilnych odnośnie agregacji i utleniania nanocząstek metali, które zostaną wykorzystane jako funkcjonalny komponent przewodzących tuszy i past. Wykorzystanie nanocząstek niklu oraz cyny obniży koszty wytwarzania przewodzących nanomateriałów. Jednakże, wadą wspomnianych nanocząstek jest ich szybki proces utleniania w środowisku atmosferycznym, dlatego ważnym celem projektu jest utworzenie warstwy ochronnej na ich powierzchni w postaci srebra, czego wynikiem będą nanocząstki typu „core-shell” (gdzie core – Ni lub Sn, shell – Ag). Otrzymane nanocząstki posłużą, jako funkcjonalny komponent przewodzących past i tuszy, które ostatecznie zostaną wykorzystane w procesie drukowania (sitowego – ang. *screen printing*, strumieniowego – ang. *inkjet printing*) na szklanych lub plastikowych substratach.

W trakcie trzech miesięcy trwania projektu (październik-grudzień 2017) zoptymalizowano proces syntezy nanocząstek niklu jako pierwszy etap wytwarzania nanocząstek typu „core-shell”. W tym celu dobrano odpowiedni prekursor nanocząstek ($\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2$) oraz czynnik redukujący (NaBH_4). Kluczowe znaczenie w procesie syntezy nanocząstek metalicznych ma również dobór odpowiedniego czynnika stabilizującego. W tym celu zbadano wpływ różnych stabilizatorów na właściwości (rozmiar, kształt, stopień agregacji) nanocząstek niklu. Jako czynniki stabilizujące wykorzystano zarówno polimery: Poli(winylopirolidon) (PVP, MW=10000, 40000), kwas poliakrylowy (PAA, MW=8000, 15000, 240000) jak i polielektrolity: polietylenoiminę (PEI, MW=70000), polistyrenosulfonian PSS (MW= 70000). Zaobserwowano, iż zarówno rodzaj, masa molowa jak i stężenie stabilizatora odgrywa istotną rolę w syntezie nanocząstek niklu. Ni NPs o optymalnych właściwościach (rozmiar około 50 nm, rys. 1) otrzymano dla PAA (MW=240000) o stężeniu 0.01M.



Rysunek 1. Rozkład rozmiaru nanocząstek niklu. Pomiar przy użyciu metody DLS (dynamicznego rozpraszania światła).

PROJEKTY AKCJI COST UE

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



Projekt EU COST Action CM1305 ECOSTBio [2012-2018]

(koordynator krajowy: *prof. Ewa Broclawik*)

Akcja CM1305 (ECOSTBio, 2014-2018) jest częścią europejskiego projektu „European Cooperation in Science and Technology”. Fundusze europejskie zostały przeznaczone na stworzenie sieci zespołów naukowych, zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych w celu rozwiązywania interdyscyplinarnych zagadnień fizyko-chemicznych angażujących stany spinowe układu jako znaczący czynnik. Głównym zadaniem jest stworzenie bazy stanów spinowych „SPINSTATE” zawierającej dostępne dane dla interesujących układów o znanych stanach spinowych oraz ich spinowo zależnych właściwościach. Współpraca doświadczenia z teorią powinna spowodować synergiczny wzrost dostępnej informacji i pomóc zarówno teoretykom uzasadniać rozważania modelowe jak i doświadczalnikom tworzyć nowe materiały o ulepszonych właściwościach.

W roku 2017 zostały zrealizowane dwa spotkania organizacyjno-naukowe: VI warsztaty naukowe w Lizbonie (Portugalia), 30-31 marca 2017 oraz VII warsztaty naukowe w Dublinie (Irlandia), 14-15 grudnia 2017. W obydwu spotkaniach uczestniczyła Ewa Broclawik jako polski przedstawiciel w Management Committee. W ramach akcji kontynuowano współpracę ze Słowacją (grupa prof. Bucko) oraz Wielką Brytanią (grupa prof. de Vissera), w ramach których opublikowano dwie prace w roku 2017. Nawiązano także współpracę z Niemcami (grupa prof. Hungera) oraz wymianę naukową z Republiką Malty.



NEUBIAS A New Network of European BioImage Analysts to Advance Life Science Imaging

Projekt EU COST Action CA 15124 NEUBIAS [2016-2020]

(wykonawca krajowy: dr Marcel Krzan)

Program COST – BioImage Analysis to nowo stworzona sieć naukowa łącząca naukowców z wielu dziedzin szeroko rozumianego Life-Science wykorzystujących w pracy badawczej zaawansowane narzędzia obróbki cyfrowej obrazu (Image Analysis). Zadaniem akcji jest zapewnienie szerokiego kontaktu i wymiany wiedzy pomiędzy wspomnianymi wyżej naukowcami. Pragniemy to osiągnąć poprzez organizowanie spotkań i konferencji naukowych poświęconych zagadnieniom analizy obrazu. W sieci uczestniczą naukowcy związani z obserwacjami mikroskopowymi w dziedzinach Life-Science oraz związany z tym sektor prywatny. Zadaniem Akcji jest wypracowanie sieci współpracy pomiędzy jej uczestnikami z różnych Europejskich instytucji naukowych. Pragniemy również opracować najlepsze możliwe narzędzia i wskazówki do dobrej, praktycznej analizy obrazu. W ramach Akcji zostało stworzone (i jest ciągle rozszerzane) interaktywne archiwum internetowe, zawierające najnowsze opracowane przez członków akcji narzędzia do obróbki obrazów (programy, makra, itp.), które powinny ułatwiać tworzenie nowego oprogramowania związanego z automatyczną analizą obrazu. Została również stworzona platforma benchmarkowa zawierająca wszystkie opracowane narzędzia. W celu zwiększenia ilości ekspertów w zakresie cyfrowej analizy obrazu Akcja również prowadzi cykl kursów i szkoleń, opracowuje podręczniki oraz oferuje możliwość odbycia krótkich staży szkoleniowo-badawczych (COST STSM) w stowarzyszonych grupach badawczych.

Jako członek zwyczajny Akcji COST CA15124 (nie jestem członkiem Management Committee) w trakcie pierwszego roku trwania programu współpracowałem online z innymi stowarzyszonymi w akcji naukowcami.

Współpraca miała na celu znalezienie najlepszych rozwiązań w zakresie automatycznej cyfrowej analizy obrazu związanej z prowadzonymi przeze mnie badaniami związanymi z wynoszeniem pęcherzyków oraz procesami starzenia się frakcji pianowych. Dzięki wykorzystaniu nowej „listy e-mailowej” członków akcji oraz interaktywnych bibliotek narzędzi do analizy obrazu stworzyłem nowe, innowacyjne oprogramowanie do analizy moich problemów badawczych.

Wyniki badań - uzyskane łatwiej i z o wiele większą precyzją dzięki nowemu oprogramowaniu - zostały już zaprezentowane w trakcie konferencji 7th Bubble and Drops international workshop, Lyon 26-30 June 2017 (4 prezentacje, 1 ustna, 3 plakaty) oraz zgłoszone na kolejną międzynarodową konferencję 17th Food Colloids Conference, 2018, Univ. Of Leeds, UK.

INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE

1. Immobilization of Metal Nanoparticles on Organo-Modified Layered Silicates

Projekt badawczy Polskiej Akademii Nauk i Slovenská Akadémia Vied [2016-2018]
(kierownictwo projektu: dr Małgorzata Zimowska, dr Helena Pálková)

Celem prowadzonego projektu było otrzymanie organopochodnych nośników mineralnych na drodze modyfikacji minerału ilastego długołańcuchowymi polikationami polimeru do immobilizacji oraz stabilizacji metalicznych nanocząstek rutenu.

Nasze badania skupiły się na określeniu oddziaływań pomiędzy ujemnie naładowanymi warstwami naturalnie występującego smektytu - Jelszowego Potoku (JP) a polikationami organicznego polimeru chlorku polydiallyldimetyloamoniowego (PDDA) przy użyciu metod spektroskopowych FTIR w średnim (MIR) oraz bliskim (NIR) zakresie. Stabilność termiczną, zawartość oraz wpływ ilości kationów organicznego polimeru na zmiany w otrzymanych układach określono za pomocą metody TG/DSC, elementarnej analizy zawartości węgla (Carbon Elemental Analysis CEA) oraz metod spektroskopii transmisyjnej FTIR-MIR ($4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$) i odbiciowej DRIFT FTIR-NIR ($8000 - 4000 \text{ cm}^{-1}$).

Organopochodne mineralne o różnej zawartości polimeru (JP-PDDA_5% and JP-PDDA_25%) otrzymano w wyniku delaminacji Na-montmorillonitu i interkalacji długich łańcuchów polydiallyldimetyloamoniowych (PDDA) pomiędzy warstwowo JP.

Wprowadzenie jonów PDDA skutkowało pojawieniem się na widmie FTIR-MIR pasm związanych z drganiami grupy C-H: drganiami rozciągającymi $\nu\text{C-H}$ w zakresie $2970\text{-}2860 \text{ cm}^{-1}$ i zginającymi $\delta\text{C-H}$ w zakresie $1490\text{-}1380 \text{ cm}^{-1}$.

Elementarna analiza węglowa wykazała wyższą zawartość węgla w próbce JP-PDDA_25%, co towarzyszyło zwiększonej intensywności pasm ν i δ wiązań C-H potwierdzając wzrost kompensacji ładunku warstwy kationami organicznego polimeru.

Ilość wprowadzonego polimeru wpłynęła na kształt widma NIR dostarczając informacji komplementarnych do uzyskanych z zakresu MIR. Rezultatem było pojawienie się na widmach NIR nowych pasm związanych z pierwszym nadtonem (2ν) CH w zakresie $6100\text{-}5500 \text{ cm}^{-1}$ oraz modu kombinacyjnego ($\nu+\delta$) poniżej 4500 cm^{-1} .

Analiza termogravimetryczna (TG) oraz profil różnicowy (DTG) Na-montmorillonitu JP oraz organopochodnych mineralnych wykazały trzy etapy dekompozycji związane z utratą zaadsorbowanych molekuł wody na powierzchni minerału, dehydratacji zhydratyzowanych międzywarstwowych kationów Na^+ , dehydroxylacji nieorganicznych warstw minerału. W organopochodnych mineralnych utrata masy związana z dehydratacją kationową nakładała się ze spadkiem masy przypisanym termicznej degradacji polikationowego surfaktanta.

Ze względu na bardziej hydrofobowy charakter próbki JP-PDDA_25% utrata masy przypisana uwalnianiu zaadsorbowanych cząsteczek wody była niższa w porównaniu z JP-PDDA_5%. Zaobserwowano jednak bardziej wyraźny spadek masy związany z rozkładem fazy organicznej dla kompozytu o większym obciążeniu polielektrolitem. Dane te są w dobrej zgodności z analizą FTIR oraz CEA potwierdzającą wyższą zawartość łańcuchów polimeru PDDA interkalowanego w przestrzeniach międzywarstwowych oraz na powierzchni płytek JP w układzie JP-PDDA_25%.

2. Biocompatible Particle-Stabilized Foams and Emulsions as Carriers for Healing Agents

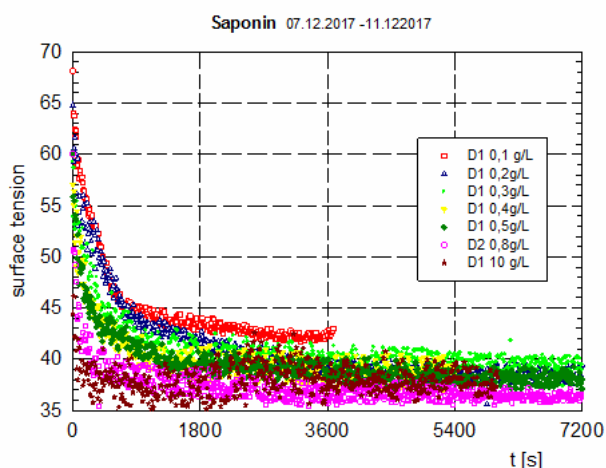
Projekt badawczy Polskiej Akademii Nauk i Consiglio Nazionale delle Ricerche [2017-2019]
(kierownictwo projektu: dr Marcel Krzan, dr Francesca Ravera)

Celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania i nanoszenia stabilnych pian ciekłych oraz emulsji wytwarzanych na bazie mieszanin hypoalergicznym, nietoksycznym biologicznym polimerów, głównie tzw. biosurfaktantów. Chcemy wykorzystać dobrze znane proteiny (saponina, surowicza albumina wołowa, β -laktoglobulina, etc.) jako modelowe zielone surfaktanty. Podobne filmy powierzchniowe mogłyby w niedalekiej przyszłości stać się podstawą kompozycji substancji dermatologicznych wielorakiego zastosowania. Opracowane formułacje chcemy wzbogacić dodatkowo o nanocząstki srebra metalicznego lub inne nanocząstki pochodzenia naturalnego o (np. chitozanu, fibroiny jedwabiu lub liposomów). Filmy powierzchniowe tworzone na bazie takich kompozycji o naturalnej aktywności biologicznej byłyby pierwszą linią obrony przed różnymi patogenami. Byłyby to substancje jednocześnie nawilżające oraz regenerujące skórę. Opracowane układy poza przemysłem kosmetycznym i farmaceutycznym znalazłyby zastosowanie jako środki do konserwacji żywności oraz biologiczne odpowiedniki pestycydów. Wprowadzenie ich do produkcji i ogólnego zastosowania pozwoliłoby również na znaczną redukcję zanieczyszczenia środowiska przez stosowane obecnie syntetycznych surfaktanty w w/w produkt.

W trakcie pierwszego roku projektu wykonano pomiary dynamicznej i równowagowej aktywności powierzchniowej i elastyczności powierzchniowej w roztworach saponiny (saponin reagent grade, VWR, nr katalogowy 0163-100g) oraz chitozanu (chitosan HD, cosmetic ingredient). Na podstawie uzyskanych wyników określono przedziały stężeń badanych substancji i mieszanin niezbędne do wykształcenia stabilnego filmu pianowego, co zostało zweryfikowane we wstępnych testach w aparacie do pomiarów stabilności pian oraz za pomocą metody double-syringe.

Badania prowadzono symultanicznie wykorzystując zaplecze aparaturowe obu instytutów w Polsce i Włoszech. Środki projektu pozwoliły również na odbycie dwóch dwutygodniowych staży badawczych w Genui dla dr Marcela Krzana oraz dr Eweliny Jarek. Nasz instytut na tydzień badań odwiedziły natomiast dr Francesca Ravera (włoski PI projektu) oraz dr Eva Santini.

Uzyskane wyniki zostaną zaprezentowane w trakcie konferencji naukowych w 2018r oraz zgłoszone we wspólnej publikacji w czasopiśmie z tzw. listy filadelfijskiej.



Rysunek 1. Zmiany napięcia powierzchniowego w roztworach saponiny o różnych stężeniach

PROJEKTY PROGRAMU ERASMUS+

1. Program międzynarodowej wymiany naukowców Erasmus+ "Mobilność edukacyjna"



Projekt EU Erasmus+ [2014-2021]
(koordynator programu; dr Aleksandra Pacuła)

Program Unii Europejskiej Erasmus+ "Mobilność edukacyjna" skierowany jest do prywatnych i publicznych (państwowych) szkół wyższych i innych instytucji prowadzących działalność dydaktyczną. Ma na celu umożliwienie i ułatwienie międzynarodowej wymiany dla doskonalenia kompetencji zawodowych i językowych studentów (doktorantów) i pracowników badawczych oraz zwiększenia ich świadomości różnorodności kulturowej Europy. Mobilność doktorantów jest szczególnie pomocna dla zwiększenia ich szans na zatrudnienie w Europie po uzyskaniu przez uczestników tytułu doktora. Z kolei mobilność pracowników daje im większe możliwości rozwoju kariery w dotychczasowym miejscu pracy.

Instytut przystąpił do programu Erasmus+ w 2013 roku uzyskując Kartę Erasmus dla szkolnictwa wyższego (Erasmus Charter for Higher Education 2014-2020).

W roku 2017 zrealizowano następujące wyjazdy doktorantów (2-5 miesięczne praktyki):

- Barbara Brożek – Universidade de Aveiro, Aveiro
- Karolina Podgórna – Vysoká škola chemicko-technologická, Praga
- Karolina Tokarczyk – University of Strathclyde, Glasgow
- Magdalena Włodek – University of Bristol, Bristol

oraz pracowników (kilkudniowe szkolenia):

- Tomasz Borowski – University of Malta, Msida
- Mariusz Gackowski – Universität Stuttgart, Stuttgart
- Barbara Jachimska – University of Strathclyde, Glasgow
- Barbara Jachimska – University of Limerick, Limerick
- Marcel Krzan – Technische Universität Hamburg-Harburg, Hamburg
- Marcel Krzan – Université Paris-Sud, Orsay
- Arkadiusz Kupczak – Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven
- Michał Mosiałek – Vilniaus universitetas, Wilno
- Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk – Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela
- Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk – Università degli Studi di Catania, Catania
- Tomasz Szumelda – Universidade de Vigo, Vigo
- Tomasz Szumelda – Università degli Studi Mediterranea, Reggio di Calabria
- Agnieszka Wojtkiewicz – Rijksuniversiteit Groningen, Groningen

Z zagranicy goszczono:

- Pavlína Basařová, Vysoká škola chemicko-technologická, Praga
- Ahmet Beyce, Dumlupınar Üniversitesi, Kütahya

Efektom zagranicznych pobytów było m.in. zebranie materiału badawczego do prac doktorskich, artykułów w czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu i prezentacji konferencyjnych.

Program będzie kontynuowany w roku 2018 (przewidywane są jeszcze 2 wyjazdy doktorantów, 2 wyjazdy pracowników i 2 przyjazdy z zagranicy), a na rok szkolny 2018/2019 złożono kolejny wniosek o finansowanie.

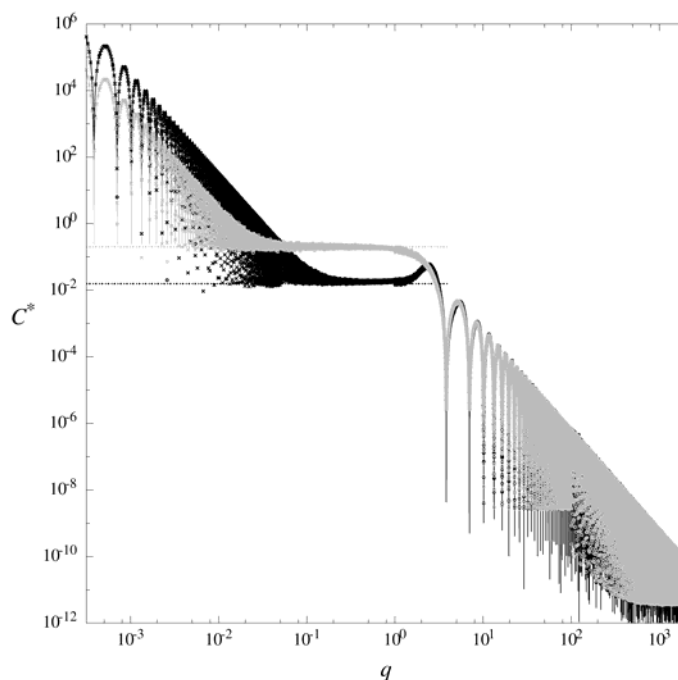
INNE OPRACOWANIA BADAWCZE

1. Szorstkość modelowych powierzchni przypadkowych

(dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN)

Szorstkość powierzchni determinuje wiele ważnych procesów i zjawisk fizykochemicznych. Odgrywa ona istotną rolę w mechanice kontaktu, przyleganiu, tarcu, odbiciu światła, ścieraniu powierzchni, barwieniu strukturalnym, mikrofluidyce, uszczelnianiu i zwilżaniu powierzchni. Dlatego w rozmaitych gałęziach nauki i przemysłu kontrolowanie szorstkości powierzchni jest problemem kluczowym. Musi on być rozwiązany w celu produkcji powierzchni antykorozyjnych, przeciwodblaskowych i superhydrofobowych, wysokiej jakości elementów optycznych, części samochodowych, manipulatorów, mikrouządzeń, itp. Prostą metodą kontrolowania szorstkości powierzchni w szerokim zakresie jest osadzanie na niej cząstek koloidalnych.

Głównym celem naszych badań był teoretyczny opis szorstkości modelowej jednorodnej powierzchni udekorowanej przypadkowo rozlokowanymi dyskami lub słupkami. Do wygenerowania takich powierzchni użyliśmy algorytmu przypadkowej adsorpcji sekwencyjnej. Następnie opracowaliśmy algorytmy numeryczne i programy komputerowe, oparte na szybkiej transformacji Fouriera, które pozwoliły nam wyznaczyć numerycznie widmową gęstość mocy wygenerowanych powierzchni. Rozwinęliśmy także ilościową analizę szorstkości powierzchni i wyprowadziliśmy ogólne równanie widmowej gęstości mocy takich powierzchni. Otrzymaliśmy wyrażenia analityczne na widmową gęstość mocy w szczególnym przypadku statystycznie izotropowych obszarów kołowych. Wyprowadziliśmy równania graniczne opisujące zachowanie tej funkcji w zakresie niskich, średnich i wysokich liczb falowych. Porównaliśmy nasze wyniki analityczne z numerycznymi i stwierdziliśmy ich dobrą zgodność.



Rysunek 1. Bezwymiarowa widmowa gęstość mocy obszarów kołowych udekorowanych przypadkowo rozlokowanymi słupkami lub dyskami. Kolor czarny reprezentuje wyniki dla słupków o wysokości 20 i pokryciu 0.05. Kolor szary reprezentuje wyniki dla dysków o wysokości 0.2 i pokryciu 0.5. Linie i symbole oznaczają odpowiednio wyniki analityczne i numeryczne. Linie ciągłe oznaczają asymptotyczne wyniki analityczne w zakresie niskich i wysokich liczb falowych. Linie kropkowane przedstawiają rozwiązania analityczne w zakresie średnich liczb falowych dla dowolnego i małego pokrycia powierzchni.

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2017

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

MONOGRAFIE

1. Z.Adamczyk "Particles at Interfaces - Interactions, Deposition, Structure", Interface Science and Technology, vol.20 (2nd edition), Academic Press, Cambridge MA 2017, pp.2-689 [ISBN 978-0-08-101248-2]

ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. E.Broclawik, M.Radoń "Wybrane zastosowania nowoczesnych metod chemii kwantowej", in "Podstawy i perspektywy chemii koordynacyjnej. Tom 2. Perspektywy i zastosowania chemii koordynacyjnej" (Z.Stasicka, G.Stochel, eds.), Wydawnictwo Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2017, chapter 20, pp.507-540 [ISBN 9788323341673]
2. V.Honcharov, V.Zazhigalov, Z.Sawlowicz, R.Socha, J.Gurgul "Structural, Catalytic, and Thermal Properties of Stainless Steel with Nanoscale Metal Surface Layer", in: "Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications" (O.Fesenko, L.Yatsenko, eds.), Springer Proceedings in Physics, vol.195, Springer 2017, pp.355-364 [ISBN 978-3-319-56244-5]
3. M.Oćwieja "Tuning the Properties of Silver Monolayers for Biological Applications", in: "Silver Nanoparticles for Biological Devices: Biocompatibility and Toxicity" (E.Cao, ed.), CRC Press, Boca Raton 2017, pp.37-54 [ISBN 9781498725330]
4. A.Płazińska, W.Płaziński, M.Koliński "Binding Affinities of Gi and Gs Proteins to the b2-Adrenergic Receptor: Insights from the Coarse-grained Molecular Dynamics Simulations", Proc. Int. Conf. on Computational Modeling & Simulation ICCMS-2017 (S.Weerasinghe, ed.), Faculty of Science, University of Colombo, Colombo 2017, pp. 280-283 [ISBN 978-955-703-0110-1]

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

1. K.Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Nattich-Rak, M.Rogowska, E.M.Serwicka "Influence of Purification Method of Na-Montmorillonite on Textural Properties of Clay Mineral Composites with TiO₂ Nanoparticles", Appl. Clay Sci., 140 (2017) 75-80
2. A.Barbasz, M.Oćwieja, M.Roman "Toxicity of Silver Nanoparticles Towards Tumoral Human Cell Lines U-937 and HL-60", Colloids Surf. B, 156 (2017) 397-404
3. A.Barbasz, M.Oćwieja, S.Walas "Toxicological Effects of Three Types of Silver Nanoparticles and Their Salt Precursors Acting on Human U-937 and HL-60 Cells", Toxicol. Mech. Methods, 27 (2017) 58-71
4. S.Basąg, F.Kovanda, Z.Piwowska, A.Kowalczyk, K.Pamin, L.Chmielarz "Hydrotalcite-Derived Co-Containing Mixed Metal Oxide Catalysts for Methanol Incineration", J. Therm. Anal. Calorim., 129 (2017) 1301-1311

5. P.Batys, S.Luukkonen, M.Sammalkorpi "Ability of Poisson-Boltzmann Equation to Capture Molecular Dynamics Predicted Ion Distribution around Polyelectrolytes, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 24583-24593
6. A.Biessikirsi, Ł.Kuterasiński, J.Pyra, M.Dworzak "On the Comparison of Emulsion Bulk Explosives Obtained from Aqueous Ammonium Nitrate Solutions", *Przem. Chem.*, 96 (2017) 571-574
7. E.Broclawik, K.Góra-Marek, M.Radoń, T.Bucko, A.Śtepniewski "The Dependence on Ammonia Pretreatment of N-O Activation by Co(II) Sites in Zeolites: a DFT and *ab initio* Molecular Dynamics Study", *J. Mol. Model.*, 23 (2017) 160-173
8. M.Cieśla, J.Barbasz "Surface Fine Structure Influence on Saturated Random Packings", *J. Chem. Phys.*, 146 (2017) 054706
9. M.Dąbkowska, M.Adamczak, J.Barbasz, M.Cieśla, B.Machaliński "Adsorption/Desorption Transition of Recombinant Human Neurotrophin 4: Physicochemical Characterization", *Langmuir*, 33 (2017) 9548-9557
10. W.Dec, M.Mosiąlek, R.P.Socha, M.Jaworska-Kik, W.Simka, J.Michalska "Characterization of *Desulfovibrio Desulfuricans* Biofilm on High-alloyed Stainless Steel: XPS and Electrochemical Studies", *Mater. Chem. Phys.*, 195 (2017) 28-39
11. P. Dubiela, R.Aina, D.Polak, S.Geiselhart, P.Humenuik, B.Bohle, S.Alessandri, R.Del Conte, F.Cantini, T.Borowski, M.Bublin, K.Hoffmann-Sommergruber "Enhanced Prp 3 IgE-binding Activity by Selective Free Fatty Acid Interaction", *J. Allergy Clinical Immunol.*, 140 (2017) 1728-1731
12. M.Elżbieciak-Wodka, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of mono- and divalent ions on the formation and permeability of polyelectrolyte multilayer films", *J. Electroanal. Chem.*, 789 (2017) 123-132
13. F.Frasca, A.M.Siani, G.R.Casale, M.Pedone, Ł.Bratasz, M.Strojecki, A.Mleczkowska "Assessment of Indoor Climate of Mogiła Abbey in Kraków (Poland) and the Application of the Analogues Method to Predict Microclimate Indoor Conditions", *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 24 (2017) 13895-13907
14. K.Gawęda, W.Płaziński "Pyranose Ring Conformations in Mono- and Oligosaccharides: a Combined MD and DFT Approach", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 20760-20772
15. T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, N.Spiridis, J.Korecki "LEEM Study of High-temperature Oxygen Structures on W(110) and Their Transformations", *Appl. Surf. Sci.*, 425 (2017) 314-320
16. J.Gurgul, E.Młyńczak, A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, K.Freindl, E.Madej, N.Spiridis, T.Ślęzak, J.Korecki "Magnetic Properties of Epitaxial CoO/Fe(001) Bilayers: The Onset of Exchange Bias as a Function of Sub-layer Thickness and Temperature", *Phys. Rev. B*, 96 (2017) 104421

17. A.Y.Gyurova, A.Michna, L.Nikolov, E.Mileva "Self-assembly of Four- and Two-antennary Oligoglycines in Aqueous Medium", *Colloids Surf. A*, 519 (2017) 106-116
18. A.Jagusiak, B.Piekarska, T.Pańczyk, M.Jemiola-Rzeminska, E.Bielańska, B.Stopa, G.Zemanek, J.Rybarska, I.Roterman, L.Konieczny "Dispersion of Single-wall Carbon Nanotubes with Supramolecular Congo Red - Properties of the Complexes and Mechanism of the Interaction", *Beilstein J. Nanotechnol.*, 8 (2017) 636-648
19. M.Jarosz, RP.Socha, P.Jóźwik, G.D.Sulka "Amperometric Glucose Sensor Based on the Ni(OH)₂/Al(OH)₄⁻ Electrode Obtained from a Thin Ni₃Al Foil", *Appl. Surf. Sci.*, 408 (2017) 96-102
20. P.J.Jodłowski, R.J.Jedrzejczyk, D.K.Chlebda, A.Dziedzicka, Ł.Kuterasiński, A.Gancarczyk, M.Sitarz "Non-Noble Metal Oxide Catalysts for Methane Catalytic Combustion: Sonochemical Synthesis and Characterisation", *Nanomater.*, 7 (2017) 174
21. P.J.Jodłowski, Ł.Kuterasiński, R.J.Jedrzejczyk, D.Chlebda, A.Gancarczyk, S.Basag, L.Chmielarz "DeNO(x) Abatement Modelling over Sonically Prepared Copper USY and ZSM5 Structured Catalysts", *Catalyst*, 7 (2017) 205
22. M.Kaczmarek, D.Zydek, J.Wilkłacz-Potoczny, M.Fornal, T.Grodzicki, E.Kochowska, K.Kozak, Ł.Gocal, W.Pohorecki, K.Matlak, J.Korecki, K.Burda "The Influence of Very Small Doses of Alpha Radiation on the Stability of Erythrocytes", *Microsc. Res. Tech.*, 80 (2017) 131-144
23. R.Karcz, J.Dedecek, B.Supronowicz, H.M.Thomas, P.Klein, E.Tabor, P.Sazama, V.Pashkova, S.Sklenak "TNU-9 Zeolite: Aluminum Distribution and Extra-Framework Sites of Divalent Cations", *Chem: European. J.*, 37 (2017) 8857-8870
24. R.Karcz, P.Niemiec, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Kryściak-Czerwenka, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, E.M.Serwicka "Effect of Cobalt Location in Keggin-type Heteropoly Catalysts on Aerobic Oxidation of Cyclooctane: Experimental and Theoretical Study", *Appl. Catal. A*, 542 (2017) 317-326
25. M.Kolasińska-Sojka, M.Włodek, M.Szuwarzyński, S.Kereiche, L.Kovacik, P.Warszyński "Properties of POPC/POPE supported lipid bilayers modified with hydrophobic quantum dots on polyelectrolyte cushions", *Colloids Surf. B*, 158 (2017) 667-674
26. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Żelazny "Dimethyl Ether Synthesis from CO₂ Hydrogenation over Hybrid Catalysts: Effects of Preparation Methods", *React. Kinet. Mech. Catal.*, 121 (2017) 317-327
27. P.B.Kowalczyk, J.Zawała, J.Drzymała "Concentration at the Minimum Bubble Velocity (CMV) for Various Types of Flotation Frothers", *Minerals*, 7 (2017) 118
28. A.Kozioł-Rachwał, T.Nozaki, K.Freindl, J.Korecki, S.Yuasa, Y.Suzuki "Enhancement of Perpendicular Magnetic Anisotropy and Its Electric Field-induced Change through Interface Engineering in Cr/Fe/MgO", *Sci. Rep.*, 7 (2017) 5993

29. A.Kozioł-Rachwał, W.Skowroński, M.Frankowski, J.Chęciński, S.Ziętek, P.Rzeszut, M.Ślęzak, K.Matlak, T.Ślęzak, T.Stobiecki, J.Korecki "Interlayer Exchange Coupling, Dipolar Coupling and Magnetoresistance in Fe/MgO/Fe Trilayers with a Subnanometer MgO Barrier", *J. Magnet. Magnet. Mater.*, 424 (2017) 189-193
30. K.Kubiak-Ossowska, K.Tokarczyk, B.Jachimska, P.Mulheran, "Bovine Serum Albumin Adsorption Mechanism at Silica Surface Revealed by Molecular Dynamics and Experimental Study", *J. Phys. Chem. B*, 121 (2017) 3975-3986
31. E.Lalik, G.Mordarski, R.P.Socha, A.Drelinkiewicz "Chaotic Variations of Electrical Conductance in Powdered Pd Correlating with Oscillatory Sorption of D₂" *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19 (2017) 7040-7053
32. M.Lipiński, R.P.Socha, A.Kędra, K.Gawlińska, G.Kulesza-Matlak, Ł.Major, K.Drabczyk, K.Łaba, Z.Starowicz, K.Gwóźdź, A.Góral, E.Popko "Studying of Perovskite Nanoparticles in PMMA Matrix Used as Light Converter for Silicon Solar Cell", *Archiv. Metallurgy Mater.*, 62 (2017) 1731-1737
33. M.Łomzik, O.Mazuryk, D.Rutkowska-Żbik, G.Stochel, P.C.Gross, M.Brindell "New Ruthenium Compounds Bearing Semicarbazone 2-Formylpyridine Moiety: Playing with Auxiliary Ligands for Tuning the Mechanism of Biological Activity", *J. Inorg. Biochem.* 175 (2017) 80-91
34. S.Łukasiewicz, E.Błasiak, K.Szczepanowicz, K.Guzik, M.Bzowska, P.Warszyński, M.Dziedzicka-Wasylewska "The Interaction of Clozapine Loaded Nanocapsules with the hCMEC/D3 Cells – In vitro Model of Blood Brain Barrier", *Colloids Surf. B*, 159 (2017) 200-210
35. M.Łukomski, M.Strojecki, B.Pretzel, N.Blades, W.L.Beltran, A.Freeman "Acoustic Emission Monitoring of Micro-damage in Wooden Art Objects to Assess Climate Management Strategies", *Insight*, 59:5 (2017) 256-264
36. J.Maciejewska-Prończuk, M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Homogenous Gold Nanoparticle Monolayers - QCM and Electrokinetic Characteristics", *Colloids Surf. A*, 514 (2017) 226-235
37. E.Madej, N.Spiridis, R.P.Socha, B.Wolanin, J.Korecki "The Nucleation, Growth and Thermal Stability of Iron Clusters on a TiO₂(110) Surface", *Appl. Surf. Sci.*, 416 (2017) 144-151
38. M.Madej-Lachowska, M.Kulawska, J.Słoczyński "Methanol as a High Purity Hydrogen Source for Fuel Cells: A Brief Review of Catalysts and Rate Expressions", *Chem. Proc. Eng.*, 38 (2017) 147-162
39. A.Magdziarz, J.C.Colmenares, O.Chernyayeva, D.Lisovytskiy, J.Grzonka, K.Kurzydłowski, K.Freindl, J.Korecki "Insight into the Synthesis Procedure of Fe³⁺/TiO₂-Based Photocatalyst Applied in the Selective photo-oxidation of Benzyl Alcohol under Sun-imitating Lamp", *Ultrasonics Sonochem.*, 38 (2017) 189-196

40. D.Majda, A.Bhattacharai, J.Riikonen, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Toyras, P.-P.Lehto "New Approach for Determining Cartilage Pore Size Distribution: NaCl-Thermoporometry", *Microporous Mesoporous Mater.*, 241 (2017) 238-245
41. D.Majda, M.Zimowska, K.Tarach, K.Góra-Marek, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym "Water Thermoporometry as a Tool of Characterization of the Textural Parameters of Mesoporous Materials", *J. Thermal Anal. Calorim.*, 127 (2017) 207-220
42. J.Michalska, M.Sowa, R.P.Socha, W.Simka, B.Cwalina "The Influence of *Desulfovibrio desulfuricans* Bacteria on a Ni-Ti Alloy: Electrochemical Behavior and Surface Analysis", *Electrochim. Acta*, 249 (2017) 135-144
43. A.Michna "Macroion Adsorption - Electrokinetic and Optical Methods", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 250 (2017) 95-131
44. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Sofińska, K.Matusik "Monolayers of Poly(amido amine) Dendrimers on Mica - In situ Streaming Potential Measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 485 (2017) 232-241
45. A.Mleczkowska, M.Strojecki, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "The Effect of Ventilation on Soiling by Particles of Outdoor and Indoor Origin in Historical Churches", *Build. Simul.*, 10 (2017) 383-393
46. J.Molenda, J.Kupecki, R.Baron, M.Blesznowski, G.Brus, T.Brylewski, M.Bućko, J.Chmielowiec, K.Ćwięka, M.Gazda, A.Gil, P.Jasiński, Z.Jaworski, J.Karczewski, M.Kawalec, R.Kluczowski, M.Krauz, F.Krok, B.Łukasik, M.Malys, A.Mazur, A.Mielewczyk-Gryn, J.Milewski, S.Molin, G.Mordarski, M.Mosiątek, K.Motyliński, E.N.Naumovich, P.Nowak, G.Paściak, P.Pianko-Oprych, D.Pomykalska, M.Rękas, A.Ściążko, K.Świerczek, J.Szmyd, S.Wachowski, T.Wejrzanowski, W.Wróbel, K.Zagórski, W.Zajac, A.Żurawska "Status Report on High Temperature Fuel Cells in Poland – Recent Advances and Achievements", *Int. J. Hydrogen Energy*, 42 (2017) 4366-4403
47. M.Morga, Z.Adamczyk, T.Basińska, P.Komar, M.Gosecka, P.Żeliszewska, M.Wasilewska "Spheroidal Microparticle Monolayers Characterized by Streaming Potential Measurements", *Langmuir*, 33 (2017) 9916-9925
48. M.Morga, Z.Adamczyk, D.Kosior "Silica Nanoparticle Monolayers on a Macroion Modified Surface: Formation Mechanism and Stability", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 22721-22732
49. M.Morga, A.Michna, Z.Adamczyk "Formation and Stability of Polyelectrolyte/polypeptide Monolayers Determined by Electrokinetic Measurements", *Colloids Surf. A*, 529 (2017) 302-310
50. O.Mykhailiv, K.Brzeziński, B.Sulikowski, Z.Olejnyczak, M.Gras, G.Lota, A.Molina-Ontoria, M.Jakubczyk, L.Echegoyen, M.E.Płońska-Brzezińska "Boron-doped Polygonal Carbon Nano-anions: Synthesis and Applications in Electrochemical Energy Storage", *Chem. European J.*, 23 (2017) 7132-7141

51. B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Dula, E.Bielańska, W.Rojek, T.Machej, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Composites Derived from Exfoliated Laponite and Mn-Al Hydrotalcite Prepared in Inverse Microemulsion: A New Strategy for Design of Robust VOCs Combustion Catalysts", *App. Catal. B*, 211 (2017) 46-56
52. B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, M.Rogowska, E.Bielańska, W.Rojek, A.Gaweł, M.Wójcik-Bania, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Novel Montmorillonite/TiO₂/MnAl-Mixed Oxide Composites Prepared from Inverse Microemulsions as Combustion Catalysts", *Materials*, 10 (2017) 1326
53. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Cieśla, M.Kąkol "Formation Mechanism of Human Serum Albumin Monolayers on Positively Charged Polymer Microparticles", *Colloids Surf. B*, 159 (2017) 929-936
54. E.Niedziałkowska, B.Mrugała, A.Rugor, M.P.Czub, A. Skotnicka, J.J.Cotelesage, G.N.George, M.Szaleniec, W.Minor, K.Lewiński "Optimization of Overexpression of a Chaperone Protein of Steroid C25 Dehydrogenase for Biochemical and Biophysical Characterization", *Protein Expr. Purif.*, 134 (2017) 47-62
55. M.Oćwieja, A.Barbasz, S.Walas, M.Roman, C.Paluszkiwicz "Physicochemical Properties and Cytotoxicity of Cysteine-functionalized Silver Nanoparticles", *Colloids Surf. B*, 160 (2017) 429-437
56. M.Oćwieja, J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, M.Roman "Formation of Positively Charged Gold Nanoparticle Monolayers on Silica Sensors", *J. Colloid Interface Sci.*, 501 (2017) 192-201
57. M.Oćwieja, K.Matras-Postolek, J.Maciejewska-Prończuk, M.Morga, Z.Adamczyk, S.Sovinska, A.Żaba, M.Gajewska, T.Król, K.Cupiał, M.Bredol "Formation and Stability of Manganese-doped ZnS Quantum Dot Monolayers Determined by QCM-D and Streaming Potential Measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 503 (2017) 186-197
58. M.Oćwieja, A.Węgrzynowicz, J.Maciejewska-Prończuk, P.Michorczyk, Z.Adamczyk, M.Roman, E.Bielańska "Preparation of Iron Oxide Nanoparticles Doped by Chromium for Application in Water-gas Shift Reaction", *Colloids Surf. A*, 523 (2017) 71-80
59. J.Olszówka, R.Karcz, B.D.Napruszewska, D.Duraczyńska, A.Gaweł, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Baeyer-Villiger Oxidation of Cyclohexanone with H₂O₂/Acetonitrile over Hydrotalcite-like Catalysts: Effect of Mg/Al Ratio on the ε-Caprolactone Yield", *Catal. Commun.*, 100 (2017) 196-201
60. A.F.Orliukas, V.Venckutė, S.Daugėla, A.Kežionis, A.Dindune, D.Valdniece, J.Ronis, M.Lelis, M.Mosialek, T.Šalkus "Synthesis, Structure and Impedance Spectroscopy of NaCsZn_{0.5}Mn_{0.5}P₂O₇ Pyrophosphate Ceramics", *Solid State Ionics*, 302 (2017) 92-97
61. Ł.Orzeł, J.Waś, A.Kania, A.Susz, D.Rutkowska-Żbik, J.Staroń, M.Witko, G.Stochel, L.Fiedor "Factors Controlling the Reactivity of Divalent Metal Ions Towards Pheophytin a", *J. Biol. Inorg. Chem.* 22 (2017) 941-952

62. H.Pálková, M.Zimowska, L.Jankovič, B.Sulikowski, E.M.Serwicka, J.Madejová "Thermal Stability of Tetrabutyl-Phosphonium and -Ammonium Exchanged Montmorillonite: Influence of Acid Treatment", *Appl. Clay Sci.*, 138 (2017) 63-73
63. A.Pawlik, K.Hnida, R.P.Socha, E.Wiercigroch, K.Małek, G.D.Sulka "Effects of Anodizing Conditions and Annealing Temperature on the Morphology and Crystalline Structure of Anodic Oxide Layers Grown on Iron", *Appl. Surf. Sci.*, 426 (2017) 1084-1093
64. E.Pięta, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Potential Drug-nanosensor Conjugates: Raman, Infrared Absorption, Surface-Enhanced Raman, and DFT Study of Indolic Molecules", *Appl. Surf. Sci.*, 404 (2017) 168-179
65. E.Pięta, N.Piergies, M.Oćwieja, H.Domin, C.Paluszkiwicz, E.Bielańska, W.M.Kwiatek "Monitoring the Interfacial Behavior of Selective Y5 Receptor Antagonist on Colloidal Gold Nanoparticle Surfaces: Surface-enhanced Vibrational Spectroscopy Studies", *J. Phys. Chem. C*, 121 (2017) 17276-17288
66. W.Płaziński, A.Płazińska "Molecular Dynamics Simulations of Hexopyranose Ring Distortion in Different Force Fields", *Pure Appl. Chem.*, 89 (2017) 1283-1294
67. W.Płaziński, A.Płazińska "Stereoselective Binding of Agonists to the beta2-Adrenergic Receptor. Insights into Molecular Details and Thermodynamics from Molecular Dynamics Simulations", *Molec. Biosyst.*, 13 (2017) 910-920
68. K.Podgórna, K.Jankowska, K.Szczepanowicz "Polysaccharide gel nanoparticles modified by the Layer-by-Layer technique for biomedical applications", *Colloids Surf.A*, 519 (2017) 192-198
69. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, M.Gajdošová, F.Štěpánek, P.Warszyński "Gadolinium Alginate Nanogels for Theranostic Applications", *Colloids Surf. B*, 153 (2017) 183-189
70. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, P.Goszczycki, K.Ostrowska, W.Łasocha "X-Ray Powder Diffraction Aata for Three Red Azo Pigments: Sodium, Barium, and Ammonium Lithol Salts", *Powder Diffr.*, 32 (2017) 187-192
71. M.Reyes, M.Piotrowski, S.K.Ang, J.Chan, S.He, J.J.H.Chu, J.C.Y.Kah "Exploiting the Anti-Aggregation of Gold Nanostars for Rapid Detection of Hand, Foot, and Mouth Disease Causing Enterovirus 71 Using Surface-Enhanced Raman Spectroscopy", *Anal. Chem.*, 89 (2017) 5373-5381
72. A.Rugor, M.Tataruch, J.Staroń, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, P.Nowak, A.Hogendorf, A.Michalik-Zym, D.B.Napruszewska, A.Jarzębski, K.Szymańska, W.Białas, M.Szaleniec "Regioselective Hydroxylation of Cholecalciferol, Cholesterol and other Sterol Derivatives by Dteroid C25 Dehydrogenase", *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 101 (2017) 1163-1174
73. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, E.Niedziałkowska, S.Mordalski, J.Staroń A.Bojarski, M.Szaleniec "Reaction Mechanism of Sterol Hydroxylation by Steroid C25 Dehydrogenase – Homology Model, Reactivity and Isoenzymatic Diversity", *J. Inorg. Biochem.*, 173 (2017) 28-43

74. F.J.M.Ruiz-Cabello, M.Moazzami-Gudarzi, M.Elźbieciak-Wodka, P.Maroni "Forces Between Different Latex Particles in Aqueous Electrolyte Solutions Measured with the Colloidal Probe Technique", *Microsc. Res. Tech.*, 80 (2017) 144-152
75. B.A.Russell, B.Jachimska P.Komorek, P.A.Mulheran, Y.Chen "Lysozyme Encapsulated Gold Nanoclusters: Effects of Cluster Synthesis on Natural Protein Characteristics", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 7228-7235
76. M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Formation of Hematite Nanoparticle Monolayers of Controlled Coverage and Structure at Polymeric Microparticles", *J. Colloid Interface Sci.*, 505 (2017) 509-518
77. D.Sagnelli, J.J.K.Kirkensgaar, C.V.L.Giosafatto, N.Ogrodowicz, K.Kruczała, M.S.Mikkelsen, J.-E.Maigret, D.Lourdin, K.Mortensen, A.Blennow "All-Natural Bio-Plastics Using Starch-Betaglucan Composites", *Carbohydr. Polymers*, 172 (2017) 237-245
78. A.Sławińska, P.Serda, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "Synthesis, crystal structure and selected properties of a group of new peroxomolybdates", *Polyhedron*, 121 (2017) 191-198
79. Z.Starowicz, A.Kędra, K.Berent, K.Gawlińska, K.Gwóźdź, E.Zielony, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, K.Drabczyk, E.Płaczek-Popko, "Influence of Ag Nanoparticles Microstructure on their Optical and Plasmonic Properties for Photovoltaic Applications", *Solar Energy*, 158 (2017) 610-616
80. W.Stawiński, A.Węgrzyn, O.Freitas, L.Chmielarz, G.Mordarski, S.Figueiredo "Simultaneous Removal of Dyes and Metal Cations Using an Acid, Acid-ase and Base Modified Vermiculite as a Sustainable and Recyclable Adsorbent", *Sci. Total Environ.*, 576 (2017) 398-408
81. I.Stawoska, A.Dudzik, M.Wasylewski, M.Jemioła-Rzemińska, A.Skoczowski, K.Strzałka, M.Szaleniec, "DFT-based Prediction of Reactivity of Short-chain Alcohol Dehydrogenase", *J. Comput. Aided Mol. Des.*, 31 (2017) 587-602
82. A.van der Straeten, A.Bratak-Skicki, L.Germain, C.d'Haese, P.Eloy, C.A.Fustin, C.Dupont-Gillain "Protein-Polyelectrolyte Complexes to Improve the Biological Activity of Proteins in Layer-by-Layer assemblies"; *Nanoscale*, 9 (2017) 17186-17192
83. J.Szaleniec, A.Górski, M.Szaleniec, R.Miedzybrodzki, B.Weber-Dąbrowska, P.Stręk, J.Składzień "Can Phage Therapy Solve the Problem of Recalcitrant Chronic Rhinosinusitis?", *Future Microbiol.*, 12 (2017) 1427-1442
84. K.Szczepanowicz, G.Para, K.A.Wilk, P.Warszyński "Co-adsorption of Polyanions and Esterquat Surfactants; Effect on Formation and Stability of Micellar Core Nanocapsules", *Colloids Surf. A*, 519 (2017) 117-124
85. K.Szczepanowicz, P.Piechota, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Containing Iron Oxide Nanoparticles as MRI Detectable Drug Delivery System", *Colloids Surf. A*, 532 (2017) 351-356

86. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Piotrowski, A.Kida, W.Lasoń, P.Warszyński "Neuroprotective Action of Undecylenic Acid (UDA) Encapsulated into PCL Nanocarriers", *Colloids Surf. A*, 532 (2017) 41-47
87. B.Szermer-Olearnik, M.Drab, M.Mąkosa, M.Zembala, J.Barbasz, K.Dąbrowska, J.Boratyński "Aggregation/dispersion Transitions of T4 Phage Triggered by Environmental Ion Availability", *J. Nanobiotechnol.*, 15 (2017) 32
88. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, M.Góral-Kurbiel, J.Gurgul, D.Duraczyńska "Formation of Pd-Group VIII Bimetallic Nanoparticles by the 'Water-in-Oil' Microemulsion Method", *Colloids Surf. A*, 529 (2017) 246-260
89. M.Szuwarzyński, K.Wolski, A.Pomorska, T.Uchacz, A.Gut, Ł.Łapok, S.Zapotoczny "Photoactive Surface-Grafted Polymer Brushes with Phthalocyanine Bridging Groups as an Advanced Architecture for Light Harvesting", *Chem. European J.*, 23 (2017) 11239-11243
90. K.A.Tarach, J.Tekla, U.Filek, A.Szymocha, I.Tarach, K.Góra-Marek "Alkaline-acid Treated Zeolite L as Catalyst in Ethanol Dehydration Process", *Microporous Mesoporous Mater.*, 241 (2017) 132-144
91. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Quantitative Interpretation of PAMAM Dendrimers Adsorption on Silica Surface", *J. Colloid Interface Sci.*, 503 (2017) 86-94
92. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu²⁺ in Keggin Anion - Influence of Copper Position on Electronic Structure/Redox Properties of Heteropolyacids. DFT Cluster Model", *J. Mol. Struct.*, 1135 (2017) 20-25
93. L.Tosheva, S.Belkhair, M.Gackowski, S.Malic, N.Al.-Shanti, J.Verran "Rapid Screening of the Antimicrobial Efficacy of Ag Zeolites", *Colloids Surf. B*, 157 (2017) 254-260
94. B.Tyliszczak, S.Kudłacik-Kramarczyk, A.Drabczyk, M.Krzan "Porównanie matryc hydrożelowych na bazie polisacharydów - Comparison of hydrogel matrixes on the basis of polysaccharides", *Przem. Chem.*, 96 (2017) 2540-2543
95. T.Urbańczyk, M.Strojecki, M.Krośnicki, A.Kędziorski, P.S.Żuchowski, J.Koperski "Interatomic Potentials of Metal Dimers: Probing Agreement between Experiment and Advanced *ab initio* Calculations for van der Waals Dimer Cd₂", *Int. Rev. Phys. Chem.*, 36 (2017) 541-620
96. A.Wawro, Z.Kurant, M.Tekielak, P.Nawrocki, E.Milińska, A.Pietruczik, M.Wójcik, P.Mazalski, J.Kanak, K.Ollefs, F.Wilhelm, A.Rogalev, A.Maziewski "Engineering the Magnetic Anisotropy of an Ultrathin Co Layer Sandwiched between Films of Mo or Au", *J. Phys. D*, 50 (2017) 215004
97. D.Wiśnios, A.Kiejna, J.Korecki "Towards Understanding MgO/Fe Interface Formation: Adsorption of O and Mg Atoms on an Fe(001) Surface ", *Phys. Rev. B*, 96 (2017) 115418
98. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Wasilewska, O.Bikondoa, W.H.Briscoe, P.Warszyński "Interfacial and Structural Characteristics of polyelectrolyte Multilayers Used as Cushions for Supported Lipid Bilayers", *Soft Matter*, 13 (2017) 7848-7855

99. M.Wojnicki, E.Rudnik, R.P.Socha, K.Fitzner "Platinum(IV) Chloride Complex Ions Adsorption on Activated Carbon Organosorb 10CO", *Australian J. Chem.*, 70 (2017) 769-775
100. M.Wojnicki, R.P.Socha, M.Luty-Błoch, K.Fitzner "Kinetic Studies of the Removal of Pt(IV) Chloride Complex Ions from Acidic Aqueous Solutions Using Activated Carbon", *React. Kinet. Mech. Catal.*, 120 (2017) 715-734
101. P.Wolski, J.Narkiewicz-Michalek, M.Pańczyk, G.Pastorin, T.Pańczyk "Molecular Dynamics Modeling of the Encapsulation and De-encapsulation of the Carmustine Anticancer Drug in the Inner Volume of a Carbon Nanotube", *J. Phys. Chem. C*, 121 (2017) 18922-18934
102. P.Wolski, K.Nieszporek, T.Pańczyk "Pegylated and Folic Acid Functionalized Carbon Nanotubes as pH Controlled Carriers of Doxorubicin. Molecular Dynamics Analysis of the Stability and Drug Release Mechanism", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 9300-9312
103. L.Zaraska, K.Gawlak, M.Gurgul, D.K.Chlebda, R.P.Socha, G.D.Sulka "Controlled Synthesis of Nanoporous Tin oxide Layers with Various Pore Diameters and their Photoelectrochemical Properties", *Electrochim. Acta*, 254 (2017) 238-245
104. J.Zawała, C.Karaguzel, A.Wiertel, O.Sahbaz, K.Małyśa "Kinetics of the Bubble Attachment and Quartz Flotation in Mixed Solutions of Cationic and Non-ionic Surface-active Substances", *Colloids Surf. A*, 523 (2017) 118-126
105. J.Zawała, A.Niecikowska "Bubble-on-Demand Generator with Precise Adsorption Time Control", *Rev. Sci. Instrum.*, 88 (2017) 095106
106. J.Zawała, A.Wiertel, A.Niecikowska, K.Małyśa "Influence of external vibrations on bubble coalescence time at water and oil surfaces – experiments and modelling", *Colloids Surf. A*, 519 (2017) 137-145
107. K.Ziewiec, M.Wojciechowska, J.Ferenc, M.Lis, D.Mucha, J.Morgiel, A.Ziewiec "Thermal Characteristics and Amorphization in Plasma Spray Deposition of Ni-Si-B-Ag Alloy", *J Alloys Comp.*, 710 (2017) 685-691
108. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas "Hydrogenolysis of Glycerol to Propylene Glycol over Cu/Oxide Catalysts: Influence of the Support and Reaction Conditions", *React. Kinet. Mech. Catal.*, 121 (2017) 329-343
109. P.Żeliszewska, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Monolayers of Immunoglobulin G on Polystyrene Microparticles and Their Interactions with Human Serum Albumin", *J. Colloid Interface Sci.*, 490 (2017) 587-597

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY MNiSW (LISTA B)

1. M.Dudek, B.Lis, A.Raźniak, Ł.Zych, A.Rapacz-Kmita, M.Gajek, R.P.Socha, M.Mosiąlek, M.Reben "Comparative Studies of the Electrochemical Behaviour of $\text{Me|Ba}_{0.95}\text{Ca}_{0.05}\text{Ce}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{O}_3$, $\text{Me|Ce}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{O}_{1.9}$, and $\text{Me|Zr}_{0.84}\text{Y}_{0.16}\text{O}_{1.9}$ Systems Caused by Long-term Cathode Polarisation, here Me = Ag, Au Quasi-point Electrodes", *Inżynieria Materiałowa*, 2 (2017) 58-68

2. E.Jarek, D.Białek-Kostecka, A.Forczek-Sajdak, Z.Kaszowska, M.L.Walczak "Polimery syntetyczne -ratunek czy zagrożenie dla utrwalonych malowideł ściennych - badania zwilżalności warstw malarskich", *Materiały Ceramiczne*, 69(4) (2017) 1-6
3. G.Nawrat, M.Gonet, G.Lach, Ł.Nieużyła, A.Koszorek, P.Nowak, M.Pawlicki "Stripping of Copper Coatings from Steel Elements Subjected to Thermochemical Treatment", *Ochrona przed Korozją*, 60 (2017) 118-124
4. G.Nawrat, M.Wierzbińska, A.Misztal, M.Gonet, G.Lach, Ł.Nieużyła, A.Koszorek, P.Nowak "Plasma Electrolytic Oxidation of Magnesium Alloy AZ91D", *Ochrona przed Korozją*, 60 (2017) 131-135

POZOSTAŁE PUBLIKACJE NAUKOWE (BEZ OKREŚLONEGO IF)

1. G.Liskiewicz, B.Jachimska, K.Zapadka "Innovation & Impact – journal story and mission", (G.Liskiewicz, B.Jachimska, K.Zapadka, eds.), *Innovation & Impact*, Warszawa 2017, pp.108-111 [ISBN 978-83-65644-32-9]
2. G.Mordarski "Ogniwa paliwowe", *Biuletyn SEP Oddział Tarnów*, 56 (2017) 74-79
3. M.Szaleniec, A.Rugor "Enzymy - katalizatory życia", *Wszechświat*, 118 (2017) 108-117
4. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabas, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Formed Through Layer by Layer Approach as an Alternative Camptothecin Delivery System", *FEBS J.*, 284 (2017) 341-341
5. T.Urbańczyk, M.Krośnicki, M.Strojecki, A.Pashov, A.Kędziorski, P.Żuchowski, J.Koperski "Interatomic Potentials of van der Waals Dimers Hg₂ and Cd₂: Probing Discrepancies between Theory and Experiment", *J. Physics Conf. Series*, 810 (2017) 012018
6. M.Zajac, T.Giela, J.Korecki, M.Sikora, M.J.Stankiewicz, A.I.Wawrzyniak "Status and First Results of the PEEM/XAS Beamline Commissioning Process", *Bull. Polish Synchrotron Radiation Society*, 16 (2017) 10

Publikacje ogłoszone w formie elektronicznej 2017

1. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, S.Jarczewski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchical Zeolites Y Obtained by Desilication: Porosity, Acidity and Catalytic Properties", *Microporous Mesoporous Mater.*, DOI: 10.1016/j.micromeso.2017.11.051
2. T.Hunter, R.Bonetta, A.Sacco, M.Vella, P.M.Sultana, C.HTrinh, H.B.R.Fadia, T.Borowski, R.Garcia Fandiño, T.Stockner, G.J.Hunter "A Single Mutation is Sufficient to Modify the Metal Selectivity and Specificity of a Eukaryotic Manganese Superoxide Dismutase to Encompass Iron", *Chem. European J.*, (2018) DOI: 10.1002/chem.201704655
3. A.Miłaczewska, E.Kot, J.A.Amaya, T.M.Makris, M.Zajac, J.Korecki, A.Chumakov, B.Trzewik, S.Kędracka-Krok, W.Minor, M.Chruszcz, T.Borowski "On Structure and Reaction Mechanism of Human Acireductone Dioxygenase", *Chem. European J.*, (2018) DOI: 10.1002/chem.201704617

PUBLIKACJE Z ROKIEM WYDANIA 2018

1. M.Gackowski, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, B.Sulikowski, J.Datka "IR and NMR Studies of Hierarchical Material Obtained by the Treatment of Zeolite Y by Ammonia Solution", *Spectrochim. Acta A*, 193 (2018) 440-446
2. A.Jagusiak, B.Piekarska, K.Chłopaś, E.Bielańska "Congo Red Interactions with Single-Walled Carbon Nanotubes", in: "Self-Assembled Molecules - New Kind of Protein Ligand (I.Roterman, L.Konieczny, eds.)", Springer International Publishing, 2018, pp.121-132 [ISBN 978-3-319-65638-0]
3. D.Kosior, J.Zawała "Initial Degree of Detaching Bubble Adsorption Coverage and Kinetics of Dynamic Adsorption Layer Formation", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (2017) 2403-2412
4. A.Kirpsza, E.Lalik, G.Mordarski, A.Micek-Ilnicka "Catalytic Properties of Carbon Nanotubes-Supported Heteropolyacids in Isopropanol Conversion", *Appl. Catal. A*, 549 (2018) 254-262
5. M.Kołodziej, E.Lalik, J.C.Colmenares, P.Lisowski, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Physicochemical and Catalytic Properties of Pd/MoO₃ Prepared by the Sonophotodeposition Method", *Mater. Chem. Phys.*, 204 (2018) 361-372
6. D.Kosior, P.B.Kowalczyk, J.Zawała "Surface Roughness in Bubble Attachment and Flotation of Highly Hydrophobic Solids in Presence of Frother – Experiment and Simulations", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 54 (2018) 63-72
7. A.Kupczak, A.Sadłowska-Sałęga, L.Krzemień, J.Sobczyk, J.Radoń, R.Kozłowski "Impact of Paper and Wooden Collections on Humidity Stability and Energy Consumption in Museums and Libraries", *Energ. Buildings*, 158 (2018) 77-85
8. K.Kurpiewska, A.Biela, J.I.Loch, S.Świątek, B.Jachimska, K.Lewiński "Investigation of High Pressure Effect on the Structure and Adsorption of β -Lactoglobulin", *Colloids Surf. B*, 161 (2018) 387393
9. A.Kusior, J.Banaś, A.Trenczek-Zajac, P.ZZubrzycka, A.Micek-Ilnicka, M.Radecka "Structural Properties of TiO₂ Nanomaterials", *J. Mol. Struct.*, 1157 (2018) 327-336
10. Ł.Lamch, A.Jarzycka, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, K.A.Wilk "Nonequivalent Adsorption of pH-Responsive Dicarboxylic Sugar Surfactants at the Air/Solution Interface", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 54 (2018) 102-110
11. K.Luberda-Durnaś, P.Sanz-Camacho, A.González-Guillén, D.Mucha, E.Bielańska, W.Łasocha "Characterisation of Organic-inorganic Hybrid Materials of the Types Zn_xCd_{1-x}Se(1,3-Diaminopropane)_{1/2} and ZnS_ySe_{1-y}(1,3-Diaminopropane)_{1/2}", *Mater. Res. Bull.*, 100 (2018) 18-25
12. K.Lunkenheimer, M.Krasowska, J.Zawała "Honorary Note: Kazimierz Małyśa", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 54 (2018) 1-9

13. K.Pańczyk, W.Płaziński "Pyranose Ring Puckering in Aldopentoses, Ketoheptoses and Deoxyaldohexoses. A Molecular Dynamics Study", *Carbohydr. Res.*, 455 (2018) 62-70
14. L.Perrin, A.Pajor-Świerzy, S.Magdassi, A.Kamysny, F.Ortega, R.G.Rubio "Evaporation of Nanosuspensions on Substrates with Different Hydrophobicity", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 10 (2018) 3082-3093
15. A.Płazińska, W.Płaziński, R.Luchowski, A.Wnorowski, W.Grudzinski, W.Gruszecki "Ligand-induced Action of the W2866.48 Rotamer Toggle Switch in β 2-Adrenergic Receptor", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (2018) 581-594
16. M.Radlik, W.Juszczak, K.Matus, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, Z.Karpiński, "Generation of Palladium Silicide in the PdAu-SiO₂ Nanocomposites during Heating in Hydrogen", *J. Alloys Compounds*, 735 (2018) 349-35
17. P.Stoch, M.Ciecińska, A.Stoch, Ł.Kuterasiński, I.Krakowiak "Immobilization of Hospital Waste Incineration Ashes in Glass-Ceramic Composites", *Ceram. Int.*, 44 (2018) 728-734
18. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Kosydar, D.Duraczyńska, J.Gurgul "Carbon-supported Pd_{100-x}Au_x Alloy Nanoparticles for the Electrocatalytic Oxidation of Formic Acid; Influence of Metal Particles Composition on Activity Enhancement", *Appl. Catal. B*, 221 (2018) 393-405
19. M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Matlak, P.Dróżdź, J.Korecki "Adsorption Induced Modification of In-plane Magnetic Anisotropy in Epitaxial Co and Fe/Co Films on Fe(110)", *AIP Adv.*, 8 (2018) 056806
20. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, D.Wojnar, P.Żeliszewska "Silver Nanoparticle/fibrinogen Bilayers – Mechanism of Formation and Stability Determined by in situ Electrokinetic Measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 513 (2018) 170-179
21. H.Zubik, O.Mykhailiv, A.Papathanassiou, B.Sulikowski, E.Zambrzycka, M.Bratychak, M.E.Płońska-Brzezińska "Phenol-formaldehyde Polymeric Network to Generate Organic Aerogels: Synthesis, Physicochemical Characteristics and Potential Applications", *J. Mater. Chem. A*, 6 (2018) 845-852

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Z.Adamczyk "Monowarstwy nanocząstek na powierzchniach stałych: mechanizm tworzenia, stabilność, zastosowania", *Book of Abstracts. Konf. Fizykochemia Granicy Faz, Lublin 2017* [ISBN 978-83-65133-18-2]
2. Z.Adamczyk "Nanopraticle Mono- and Bilayers: Formation, Stability, Applications", *Book of Abstracts. 7th Int. Colloids Conf., Sitges, Barcelona 2017*
3. Z.Adamczyk "Adsorption mechanisms of nanoparticles and proteins", *Book of Abstracts. 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2017*

4. Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas, D.Lupa "Oksydacyjne roztwarzanie nanocząstek srebra - nowy model kinetyczny", Book of Abstracts. Konf. Fizykochemia Granicy Faz, Lublin 2017 [ISBN 978-83-65133-18-2]
5. K.Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, A.Michalik-Zym, B.D Napruszewska, M.Nattich-Rak, M.Rogowska, E.M.Serwicka "Influence of Purification Method of Na-Montmorillonite on the Properties of PILC-type and IMEC-type Clay Composites with TiO₂ Nanoparticles", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.181-182 [ISBN 978-83-60514-26-9]
6. S.Basąg, Z.Piwowarska, F.Kovanda, K.Pamin, L.Chmielarz "Wieloskładnikowe układy tlenkowe pochodzenia hydrotalkitowego w roli katalizatorów procesu całkowitego utleniania metanolu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.95 [ISBN 978-83-60514-26-9]
7. E.Bieleńska, J.Camra, M.Najbar, A.Weselucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Porównanie morfologii, składu chemicznego i składu fazowego tlenkowych katalizatorów do bezpośredniego rozkładu NO i do utleniania CO wytworzonych na folii ze stali AISI 321", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.183 [ISBN 978-83-60514-26-9]
8. E.Bieleńska, J.Camra, M.Najbar, A.Weselucha-Birczyńska, T.Wilkosz, Ł.Witek "Wpływ temperatury wstępnego utleniania folii ze stali AISI 321 na etap chemicznej modyfikacji powstałej warstwy tlenkowej w syntezie katalizatorów do bezpośredniego rozkładu NO i do utleniania CO", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.184-185 [ISBN 978-83-60514-26-9]
9. A.Biessikirski, Ł.Kuterasiński, J.Pyra, M.Dworzak "Porównanie właściwości topograficznych i morfologicznych materiałów wybuchowych emulsyjnych otrzymanych na bazie wodnego roztworu saletry amonowej oraz RSM", Materiały Konferencyjne. 14th Int. Conf. 'Explosives Research - Application – Safety' IPOEX 2017, Instytut Przemysłu Organicznego, Warszawa 2017, p.54-55
10. A.Biessikirski, Ł.Kuterasiński, J.Pyra, M.Dworzak, M.Twardosz "Własności topologiczne oraz morfologiczne materiałów wybuchowych na bazie nawozów mineralnych", Szkoła Górnictwa Odkrywkowego, Kościelisko 2017, CD-ROM, 1-19
11. B.Bożek, W.Łasocha "Związki hybrydowe nieorganiczno-organiczne na bazie MoO₃", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.187-188 [ISBN 978-83-60514-26-9]
12. B.Bożek, W.Łasocha, A.A.Valente, P.Neves "Hybrid Inorganic-organic Compounds Based on MoO₃", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.186 [ISBN 978-83-60514-27-6]
13. B.Bożek, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "Nowe polimolibdeniany amino naftalenu i ich testy w katalitycznym utlenianiu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.189-190 [ISBN 978-83-60514-26-9]

14. B.Bożek, W.Surga, A.Olech, M.Michalec, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "Nieorganiczne politrimolibdeniany i ich testy w katalitycznym utlenianiu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.190 [ISBN 978-83-60514-26-9]
15. B.Bożek, W.Surga, A.Olech, M.Michalec, P.Serda, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "New Inorganic Trimolybdates and Their Activity in Catalytic Oxidation Processes", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.187 [ISBN 978-83-60514-27-6]
16. E.Brocławik, K.Góra-Marek, M.Radoń, T.Bucko, A.Stępniewski "The Dependence of N–O Activation by Co(II) Sites in Zeolites upon Ammonia Pretreatment: IR Spectroscopy, DFT and ab initio Molecular Dynamics Study", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.49 [ISBN 978-83-60514-26-9]
17. M.Chojecki, D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "Chiral Recognition in the Intermolecular Interaction between Carvone and Menthol – Theoretical Study" Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.923
18. M.Chojecki, D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "Chiral Recognition in the Intermolecular Interaction between Carvone and Menthol", Program & Book of Abstracts, 15th Central European Symposium on Theoretical Chemistry CESTC, Wisła 2017, p. P51
19. A.Drelinkiewicz, E.Bieleńska, M.Góral-Kurbiel, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda "Controlling Nanostructure of Bimetallic Pd-M (M = Au, Ir, Pt, Ru) Catalysts Prepared by the Reverse 'Water-in-Oil' Microemulsion Method", Book of Abstracts, 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017, p.98 [ISBN 978-5-906376-16-9]
20. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko, D.Rutkowska-Żbik "HOOH/OOH⁻ as Oxidant in Porphyrin-catalysed Reactions", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.196 [ISBN 978-83-60514-27-6]
21. D.Duraczyńska, R.Socha, U.Filek, A.Bukowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Uwodornienie wybranych ketonów w obecności katalizatora rutenowego osadzonego na żywicy metakrylanowo-styrenowej", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.103-104 [ISBN 978-83-60514-26-9]
22. U.Filek, D.Duraczyńska, D.Mucha "Jednoetapowa synteza octanu etylu w obecności katalizatorów zawierających pallad", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.106 [ISBN 978-83-60514-26-9]
23. U.Filek, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Heteropolikwasy z różnym jonem centralnym w reakcji konwersji alkoholi Obliczenia DFT vs. eksperyment", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.173 [ISBN 978-83-60514-26-9]

24. U.Filek, R.P.Socha, D.Duraczyńska, D.Mucha, K.Tarach, K.Góra-Marek, M.Witko "One-Pot Synthesis of Ethyl Acetate by Oxidation of Ethanol in Gas Phase over Palladium Supported on 12-Tungstophosphoric Acid and its Phosphorus-Tungsten Bronze", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.201 [ISBN 978-83-60514-27-6]
25. M.Gackowski, B.Sulikowski, M.Hunger "Badania NMR zeolitów desilikonowanych", Materiały konferencyjne. Konf. Young from Universities, Polytechnics & Polish Academy of Sciences Nuclear Magnetic Resonance, BMMiM PAN, Łódź 2017
26. M.Gackowski, B.Sulikowski, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, K.Tarach, S.Jarczewski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchical Zeolites FAU: Porosity, Acidity and Catalytic Properties", Book of Abstracts. 21st Zeolite Forum, Polish Zeolite Association, Poznań 2017, p.47 [ISBN 978-83-62783-10-6]
27. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, S.Jarczewski, B.Sulikowski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchical Zeolites Y: Catalysts of High Acidity, Mesoporosity and Catalytic Activity", Book of Abstracts. 7th FEZA Conf., Sofia 2017, p.190
28. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, B.Sulikowski, J.Datka "IR and NMR Studies of Hierarchical Zeolites Y", Programme-Abstracts-Lists of authors. 14th Int. Conf. of Molecular Spectroscopy, AGH, Kraków 2017, p.56 [ISBN 978-83-63663-94-0]
29. M.Golonka, M.Tataruch, M.Rugierro-Mikołajczyk "Ocena zmian aktywności immobilizowanej alfa-amylazy na podłożu PANI z wykorzystaniem wybranych czynników sieciujących w procesach hydrolytycznych", Książka Abstraktów. 3. Konf. Naukowa 'Enzymy w nauce i przemyśle' ENZYMOS, Lublin 2017, p.55 [ISBN 978-83-65272-63-8]
30. M.Góral-Kurbiel, M.Kołodziej, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul, E.Bielańska, U.Filek "The Influence of Keggin and Dawson Type Heteropolyacids on Electrocatalytic Activity of Pd,Pt-based Catalysts in Oxygen Reduction Reaction", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, pp.109-110 [ISBN 978-83-60514-26-9]
31. B.Jachimska "Dendrimers as a Platform for Designing Biologically Active Carriers", Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society", Lyon 2017, p.226
32. B.Jachimska "Self-Assembling Behavior of Proteins: Effect of the Interaction between Protein and Surface", Book of Abstracts. Konf. 'Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing', Żelechów 2017, p.50 [ISBN 978-83-939295-1-1]
33. B.Jachimska, P.Komorek, R.Stokłosa, S.Świątek, K.Tokarczyk "Self-Assembling Behaviour of Proteins: from Solution to Surface", Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society", Lyon 2017, p.227

34. R. Jędrzejczyk, A. Dziedzicka, D. Chlebda, Ł. Kuterasiński, R. Ważny, M. Śliwa, P. Jodłowski "Spectroscopic and Antimicrobial Characterisation of Ag, Cu, Zn and Combined Bimetal Exchanged Zeolites", Programme-Abstracts-Lists of authors. 14th Int. Conf. of Molecular Spectroscopy, AGH, Kraków 2017, p.180 [ISBN 978-83-63663-94-0]
35. P. Jodłowski, I. Czekaj, Ł. Kuterasiński, R. J. Jędrzejczyk, D. Chlebda, M. Sitarz "Comparison of Theoretical and Experimental Studies of SCR deNO_x over Cu-USY Structured Catalyst", Programme-Abstracts-Lists of authors. 14th Int. Conf. of Molecular Spectroscopy, AGH, Kraków 2017, p.342 [ISBN 978-83-63663-94-0]
36. S. Kachhap, T. Borowski "Structural Studies of the L-Carbamoylase with Active Site Bound Mono/dinuclear Co²⁺ - Molecular Dynamics Simulations", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D. Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.208 [ISBN 978-83-60514-27-6]
37. R. Karcz, P. Niemiec, K. Pamin, J. Połtowicz, B. Napruszewska, A. Michalik-Zym, M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, E. M. Serwicka "Aktywność katalityczna heteropolizwiązków dotowanych jonami kobaltu w reakcji utleniania cyklooktanu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U. Filek, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.120-121 [ISBN 978-83-60514-26-9]
38. A. Kazmierczuk, P. Lisowski, P. Kowalik, K. Antoniak-Jurak, E. Serwicka-Bahranowska, I. S. Pięta "Waste 2 Fuel Catalyst and Process Development for Waste Biomass Valorisation", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U. Filek, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.84-85 [ISBN 978-83-60514-26-9]
39. M. Kołodziej, J. C. Colmenares, P. Lisowski, E. Lalik, J. Gurgul, M. Góral-Kurbiel, A. Kornas, D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz "Katalizatory Pd/MoO₃ syntetyzowane nową metodą "Sonophotodeposition"; właściwości fizykochemiczne i katalityczne", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U. Filek, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.207-208 [ISBN 978-83-60514-26-9]
40. M. Kołodziej, E. Lalik, T. Szumęłda, R. Kosydar, J. Gurgul, D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz "A Role of H_xMoO₃ (H_xWO₃) in the Pd Catalysts in Activity/selectivity Control for Hydrogenation of Unsaturated Aldehydes", Book of Abstracts, 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017, p.37 [ISBN 978-5-906376-16-9]
41. M. Kołodziej, E. Lalik, R. Kosydar, J. Gurgul, D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz "A Role of H_xMoO₃ (H_xWO₃) in the Pd Catalysts in Activity/selectivity Control for Hydrogenation of Unsaturated Aldehydes", Book of Abstracts. Jahrestreffen Deutscher Katalytiker, Weimar 2017
42. P. Komorek, I. Brand, B. Jachimska "Determination of the Conformation and Secondary Structure of Proteins in the Adsorbed State: an Important Step Towards biomedical Applications", Book of Abstracts. Bunsentagung 2017, Kaiserslautern 2017
43. P. Komorek, B. Jachimska, I. Brand "Conformational Changes in Bovine Serum Albumin Self-assembled Monolayers", Book of Abstracts. Konf. 'Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing', Żelechów 2017, p.186 [ISBN 978-83-939295-1-1]

44. P.Komorek, K.Tokarczyk, B.Jachimska "Stabilność konformacyjna układów biopolimerowych na powierzchniach metalicznych w zastosowaniach biomedycznych", Mater. Międzyuczelniana Konf. Zaawansowanych Materiałów i Nanotechnologii, Kraków 2017
45. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Duraczyńska, A.Miąsik, D.Rutkowska-Żbik "Katalizatory hybrydowe w reakcji uwodornienia CO₂ do dimetyloeteru (DME)", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.123 [ISBN 978-83-60514-26-9]
46. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Duraczyńska, D.Rutkowska-Żbik "Synthesis of Dimethyl Ether over Hybrid Catalysts", Book of Abstracts. 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017, p.542
47. A.Kornas, M.Śliwa, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero, K.Góra-Marek, D.Rutkowska-Żbik "Hydrogenation of CO₂ to Methanol: Influence of Polymorphic ZrO₂ Phases and Copper Electronic State on Activity of Cu/ZrO₂ Catalyst", Book of Abstracts, 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017, p.36 [ISBN 978-5-906376-16-9]
48. A.Kornas, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.Miąsik, D.Duraczyńska, D.Rutkowska-Żbik, R.Grabowski "Wpływ metody syntezy i dodatku heteropolikwasów na aktywność katalizatorów hybrydowych w reakcji otrzymywania dimetyloeteru (DME)", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.433
49. R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, W.Rojek, T.Szumelda, E.Bielańska, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz "Humidity Induced Deactivation of Alumina and Silica Supported Pd, Pt, Pd-Pt Catalysts in H₂ and O₂ Recombination Reaction for Passive Autocatalytic Recombiners PAR Devices", Book of Abstracts, 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017, p.132 [ISBN 978-5-906376-16-9]
50. R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, W.Rojek, T.Szumelda, E.Bielańska, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz "Humidity Induced Deactivation of Alumina and Silica Supported Pd, Pt, Pd-Pt Catalysts in H₂ and O₂ Recombination Reaction for Passive Autocatalytic Recombiners PAR Devices", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.211 [ISBN 978-83-60514-27-6]
51. R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrogen Oxidation on SiO₂ and MoO₃ Supported Bimetallic Pd-Pt Catalysts", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.212 [ISBN 978-83-60514-27-6]
52. M.Kowacz, P.Warszyński "Protein Structural Dynamics and Interactions Modulated by Infrared Light", Book of Abstracts. 12th Conf. on the Physics, Chemistry and Biology of Water, Sofia 2017

53. M.Kowacz, P.Warszyński "Infrared Spectroscopy Study on the Effect of Light on protein Structure and Interactions. Possible Role of Nanobubbles", Book of Abstracts. 7th Visegrad Symp. on Structural Systems Biology, Nove Hradky 2017
54. M.Kowacz, P.Warszyński "Infrared Light as a Remote Physical Trigger to Affect Protein Conformational Fluctuations, Adhesion and Cohesion Behaviour", Book of Abstracts. 2nd Int. Congr. in Health Sciences Research: Towards Innovation and Entrepreneurship, Covilha 2017
55. A.Kupczak, R.Kozłowski "Dyfuzja i sorpcja pary wodnej w materiałach i obiektach papierowych", Mater. 17 Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków', Warszawa 2017, p.23
56. Ł.Kuterasiński, P.Jodłowski, A.Dziedzicka, R.Jędrzejczyk, D.Chlebda "Sonically Prepared Fe-MFI and Fe-USY Zeolites as Catalysts for DeNO_x Processes", Programme-Abstracts-Lists of authors. 14th Int. Conf. of Molecular Spectroscopy, AGH, Kraków 2017, p.287 [ISBN 978-83-63663-94-0]
57. Ł.Kuterasiński, M.Gackowski, B.Sulikowski, J.Podobiński, K.Tarach, S.Jarczewski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne hierarchicznych zeolitów Y otrzymanych metodą desilikacji", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, pp.16-17 [ISBN 978-83-60514-26-9]
58. E.Lalik, R.Kosydar, M.Kołodziej, J.Gurgul, T.Szumelda, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Efekty termiczne reakcji z udziałem wodoru; wyzwanie dla technologii OZE", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, pp.126-127 [ISBN 978-83-60514-26-9]
59. D.Lupa, Z.Adamczyk "Synthesis and Properties of Colloidal Polymer Carriers", Book of Abstracts. 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2017
60. D.Lupa, Z.Adamczyk "Synteza i właściwości polimerowych nośników koloidalnych", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.544
61. D.Lupa, Z.Adamczyk "Monowarstwy nanocząstek złota i srebra na polimerach nośnikach koloidalnych", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.1089
62. J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, A.Pomorska, M.Oćwieja "Kinetyka tworzenia biwarstw nanocząstek złota o kontrolowanych właściwościach", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.538
63. J.Maciejewska-Prończuk, A.Pomorska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Kinetyka tworzenia monowarstw i biwarstw nanocząstek złota na powierzchni sensorów", Book of Abstracts. 8. Krajowa Konf. Nanotechnologii, Łódź 2017 p.158 [ISBN 978-83-8088-712-1]

64. D.Majda, A.Bhattacharai, J.Riikonen, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Töyräs, V.-P.Lehto "New Approach to Determine Cartilage Pore Size Distribution: NaCl-Thermoporometry", Book of Abstracts. 21st Zeolite Forum, Polish Zeolite Association, Poznań 2017 [ISBN 978-83-62783-10-6]
65. J.Miąsik, W.Rojek, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik, S.Dźwigaj "Zeolit BEA dotowany niklem i miedzią w reakcji uwodornienia alkoholu i aldehydu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu i furanu", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.434
66. A.Micek-Ilnicka, A.Kirpsza, E.Lalik, G.Mordarski "Carbon Nanotubes as a Support of the Heteropolyacids Active Phase in Alcohol Conversion", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.220 [ISBN 978-83-60514-27-6]
67. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula, E.Bielańska, W.Rojek, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Composites of Laponite and Mn-Cu-Zr-Ce-Al Hydrotalcites Prepared by Inverse Microemulsion as Catalysts for Combustion of Toluene", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.221 [ISBN 978-83-60514-26-9]
68. P.Michorczyk, E.Hędrzak, A.Węgrzynowicz, R.Rachwalik, B.Sulikowski "Application of 3D Printing for Preparation of Monolithic Catalysts", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.14-15 [ISBN 978-83-60514-26-9]
69. G.Mordarski, M.Śliwa, K.Samson "Electrochemical Oxidation of Solid Carbon in Liquid Carbonates", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.2219 [ISBN 978-83-60514-27-6]
70. J.Miąsik, W.Rojek, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik, S.Dźwigaj "Katalizatory niklowe i miedziowe na nośnikach mezoporowatych w procesie uwodorniania alkoholu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu i furanu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.72 [ISBN 978-83-60514-26-9]
71. M.Morga, A.Michna, Z.Adamczyk "Influence of poly(Allylamine hydrochloride) (PAH) Macromolecules on Electrokinetic Properties of Solid Substrates", Book of Abstracts. 12th Int. Symp. on Electrokinetics, Electrosurface Phenomena in Advanced Materials and Soft Matter ELKIN 2017, Dresden 2017, p.65
72. M.Morga, A.Michna, Z.Adamczyk "Electrokinetic Studies of Polyelectrolyte/polypeptides Monolayers on Mica", Book of Abstracts. 12th Int. Symp. on Electrokinetics, Electrosurface Phenomena in Advanced Materials and Soft Matter ELKIN 2017, Dresden 2017, p.66

73. M.Mosiąlek, P.Nowak, B.Bożek, E.Bielańska, M.Dziubaniuk, J.Wyrwa, A.Keżionis, T.Šalkus, E.Kazakevičius, A.F.Orliukas "Electrical Conductivity of Ceria Based Mixed Oxides Investigated by Broadband Impedance Spectroscopy", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.222 [ISBN 978-83-60514-27-6]
74. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk "Adsorpcja nanocząstek metalicznych na powierzchniach mikrosfer polistyrenowych", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.787
75. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Kąkol, Z.Adamczyk "Adsorpcja albuminy ludzkiej na powierzchniach mikrosfer polistyrenowych", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.788
76. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Kujda "Określenie mechanizmu adsorpcji mikrosfer polistyrenowych na powierzchniach modyfikowanych albuminą ludzką", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.789
77. M.Oćwieja, A.Barbasz, M.Roman "Cytotoksyczność nanocząstek srebra o zróżnicowanych właściwościach powierzchniowych oraz kontrolowanym profilu uwalniania jonów srebra", Book of Abstracts. 8. Krajowa Konf. Nanotechnologii, Łódź 2017, p.66 [ISBN 978-83-8088-712-1]
78. M.Oćwieja, J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, M.Roman "Mechanisms and Kinetics of Deposition of Positively Charged Gold Nanoparticles on Silica Sensors", Book of Abstracts. 52 Zakopane School of Physics, Zakopane 2017 [ISBN 978-83-63542-76-4]
79. N.Ogrodowicz, A.Micek-Ilnicka "Właściwości katalityczne heteropolikwasów typu Keggina i Wellsa-Dawsona z różnymi atomami addenda", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.135-136 [ISBN 978-83-60514-26-9]
80. A.Pajor-Świerzy "Synthesis and Stabilization of Metal Nanoparticles for Conductive Inks", Book of Abstracts. CoWet Winter School, Saloniki 2017, p.5
81. A.Pajor-Świerzy, Y.Farray, A.Kamyshny, S.Magdassi "Air-stable Copper-silver Core-shell Particles as Component of Conductive Inks", Book of Abstracts. 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sandomie 2017
82. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Optimization of Methods of Synthesis of Nickel NPs as the Core of Bimetallic Structure", Book of Abstracts. 9th Int. Conf. on Nanomaterials - Research and Application, Nanocon 2017, Brno 2017, p.33-34
83. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Optimization of Method of Synthesis of Bimetallic Nanoparticles", Book of Abstracts. 2nd Interdisciplinary FNP Conference, Warszawa 2017, no 56

84. H.Palkova, M.Zimowska, L.Jankovic, E.M.Serwicka, J.Madejova "Thermo-IR Spectroscopy in the Study of Montmorillonite Modified with Tetrabutyl-Ammonium and -Phosphonium Cations", Materials of Scientific Research Abstracts. 16th Int. Clay Conf. ICC 2017, Granada 2017, p.605
85. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, W.W.Kubiak "Mechanism of Hydroxylation of Phenol with Hydrogen Peroxide in the Presence of Glycerol as Alternative Solvent", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.165 [ISBN 978-83-60514-26-9]
86. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.Serwicka-Bahranowska "Heteropolisole manganu jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do kaprolaktonu tlenem molekularnym", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.166 [ISBN 978-83-60514-26-9]
87. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.Serwicka-Bahranowska "Catalytic Activity of Cobalt, Iron and Manganese Keggin-Type Polyoxometalates in Oxidation of Cyclohexanone to Caprolactone", Book of Abstracts. Int. Workshop on Bioinorganic Redox Control 'Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection' (K.Śpiewak, ed.), Kraków 2017, p.84 [ISBN 978-83-65644-24-4]
88. K.Pamin, J.Połtowicz, E.Tabor, S.Basąg, W.W.Kubiak "Electrochemical and Spectroscopic Study on Three Generations Cobalt Porphyrins", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.267-268 [ISBN 978-83-60514-26-9]
89. K.Pamin, J.Połtowicz, R.Tokarz-Sobieraj "Decomposition of Phenol with Metalloporphyrins as Catalysts and Hydrogen Peroxide as Oxidant", Book of Abstracts. Int. Workshop on Bioinorganic Redox Control 'Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection' (K.Śpiewak, ed.), Kraków 2017, p.82 [ISBN 978-83-65644-24-4]
90. K.Pamin, M.Prończuk, J.Połtowicz, E.Serwicka-Bahranowska "Heteropoly Compounds as Catalysts for Oxidation of Cyclohexanone to ϵ -Caprolactone with Molecular Oxygen", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.230 [ISBN 978-83-60514-27-6]
91. K.Pamin, E.Tabor, J.Piotrowska, S.Basąg, J.Połtowicz, W.W.Kubiak "Effect of Substituents in Cobalt Porphyrins on Their Catalytic Activity in Cycloalkanes Oxidation with Molecular Oxygen", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.232 [ISBN 978-83-60514-27-6]
92. N.Piergies, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Monitoring of the Adsorption Process of the Anticancer Drug erlotinib onto Potential Colloidal Nanocarriers", Book of Abstracts. 52 Zakopane School of Physics, Zakopane 2017, p.59 [ISBN 978-83-63542-76-4]
93. N.Piergies, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Adsorption Geometry Variations of the Anticancer Drug onto Potential Colloidal Nanocarriers", Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka 2017, p.92 [ISBN 978-83-63663-94-0]

94. E.Pięta, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Surface-enhanced Vibrational Spectroscopy in the Search of Effective Nanosensors", Book of Abstracts. 52 Zakopane School of Physics, Zakopane 2017, p.71 [ISBN 978-83-63542-76-4]
95. E.Pięta, N.Piergies, M.Oćwieja, H.Domin, C.Paluszkiwicz, E.Bielańska, W.M.Kwiatek "Monitoring the Interfacial Behavior of LuAA33810 after Conjugation with Gold Nanoparticles: SERS and SEIA Studies", Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka 2017, p.93 [ISBN 978-83-63663-94-0]
96. J.Piotrowska, R.Karcz, E.Bielańska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Nattich-Rak, M.Krzan, E.M.Serwicka "Synthetic and Post-synthetic Modifications of Mg/Al Hydrotalcite-like Materials Used as Catalyst for Baeyer-Villiger Oxidation of Cyclohexanone with H₂O₂", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.135 [ISBN 978-83-60514-27-6]
97. J.Piotrowska, R.Karcz, E.Bielańska, B.D.Napruszewska, E.M.Serwicka "Zastosowanie mikroemulsji w/o do otrzymywania katalizatorów magnezowo-glinowych typu hydrotalkitu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.236-237 [ISBN 978-83-60514-26-9]
98. J.Piotrowska, R.Karcz, B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Wpływ anionu międzywarstwowego w strukturze hydrotalkitu na aktywność katalityczną w reakcji utleniania cykloheksanonu do ε-kaprolaktonu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.137 [ISBN 978-83-60514-26-9]
99. W.Rojek, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Żelazny, A.Kornas, J.Miąsik, D.Rutkowska-Żbik "Badania nad uwodornieniem furfuralu w kierunku furanu i 2-metylofuranu na katalizatorach chromitowych ", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.141 [ISBN 978-83-60514-26-9]
100. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, A.Kornas, K.Samson, B.Rivas Murias, F.Rivadulla, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Żelazny, D.Rutkowska-Żbik "Physico-chemical Characterization of Cathodic Thin Films on YSZ Solid Oxide Electrolyte for Fuel Cell Applications", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.235 [ISBN 978-83-60514-27-6]
101. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, A.Kornas, K.Samson, B.Rivas Murias, F.Rivadulla, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Żelazny, D.Rutkowska-Żbik "Fabrication and Examination of Cathodic Thin Films on YSZ Solid Oxide Electrolyte", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.269 [ISBN 978-83-60514-26-9]
102. A.Rugor, T.Janeczko, M.Guzik, M.Szaleniec "Selective Modifications of Steroids and Sterols by Bacterial Enzymes", Book of Abstracts. 13th Int. Symp. on Biocatalysis and Biotransformations BioTrans 2017, Budapest 2017, p.414 [ISBN 978-963-9970-76-2]

103. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, S.Mordalski, M.Szaleniec "Reaction Mechanism of Sterol Hydroxylation by Steroid C25 Dehydrogenase, Book of Abstracts. 10th Molybdenum and Tungstate Enzyme Conf., Santa Fe 2017, p.32
104. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, E.Niedziałkowska, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Reaction Mechanism of Sterol Hydroxylation by Steroid C25 Dehydrogenase: Homology Model, Reactivity and Isoenzymatic Diversity", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.22 [ISBN 978-83-60514-26-9]
105. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, E.Niedziałkowska, M.Szaleniec "Homology Model, Reactivity and Isoenzymatic Diversity of Steroid C25 Dehydrogenase, a Molybdoenzyme Hydroxylating Sterols and Vitamin D3", Book of Abstracts. 10th Molybdenum and Tungstate Enzyme Conf., Santa Fe 2017, #32
106. D.Rutkowska-Żbik "Theoretical Modelling of Catalytic Reactions", Book of Abstracts, 4th Anatolian School on Catalysis on Development of Catalysis for Green & Sustainable Technologies, Turkish Catalysis Society, Izmir 2017, p.42 [ISBN 9789756590119]
107. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Aromatyzacja metanu na MoO₃/ZSM-5: Badania DFT", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.427
108. D.Rutkowska-Żbik, Ł.Orzeł, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Transmetallation of Porphyrinoids – Insights from DFT Studies", Book of Abstracts, Workshop CAT-ICBS 2017 'Catalysis with Ions, Complexes, Biological Systems, Clusters and Surfaces', Rende 2017, p.19
109. E.M.Serwicka "Clays in the Design of Combustion Catalysts", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.50 [ISBN 978-83-60514-27-6]
110. E.M.Serwicka "Combustion Catalysts Based on Layered Minerals", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.5 [ISBN 978-83-60514-26-9]
111. K.Sofińska, M.Cieśla, J.Barbasz, E.Gudowska-Nowak "Abnormal Behavior of Rupture Force Distribution in PEI/SiO₂ System", Book of Abstracts. 30th Marian Smoluchowski Symp. on Statistical Physics: on the Uniformity of Laws of Nature, Kraków 2017, p.60
112. M.Sroczyk, A.Rugor, M.Hochołowski, M.Oszajca, M.Szaleniec "Enzymatic Oxidative Dehydrogenation of 3-Ketosteroids by cholest-4-en-3-one Δ^1 -Dehydrogenase", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.242 [ISBN 978-83-60514-27-6]
113. M.Sroczyk, A.Rugor, M.Oszajca, M.Szaleniec "Stopped Flow Enzymatic Kinetics of Fad-dependent Oxidation of 3-Ketosteroids", Book of Abstracts. Int. Workshop 'Bioinorganic Redox Control – Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection', Krakow 2017, p.71, [ISBN 978-83-65644-24-4]

114. M.Sroczyk, A.Rugor, M.Oszajca, M.Szaleniec "Badanie kinetyki enzymatycznej reakcji utleniania 3-ketosteroidów z udziałem dehydrogenazy FAD-zależnej", Mater. Forum Prac Dyplomowych Horyzonty Nauki 2017, Kraków 2017, p.50 [ISBN 978-83-945177-3-1]
115. M.Strojecki, L.Krzemień, A.Kupczak, R.Kozłowski, A.Działo, M.Łukomski, Ł.Bratasz "Direct Tracing of Micro-damage to Support Indoor Climate Management", Book of Abstracts. 3rd Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, Brighton 2017, p.7
116. M.Szaleniec, A.Rugor, M.Tataruch, J.Heider "Molybdenum Oxidoreductases - Regio- and Enantioselective Hydroxylation of Organic Compounds", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, p.28 [ISBN 978-83-60514-27-6]
117. M.Szaleniec, I.Stawoska, A.Dudzik, M.Wasylewski, M.Jemioła-Rzemińska, A.Skoczowski "DFT-based prediction of reactivity of alcohol dehydrogenase", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.45-46 [ISBN 978-83-60514-26-9]
118. K.Szczepanowicz, T.Kruk, A.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Pygylated Polyelectrolyte Nanocapsules for Biomedical Applications", Book of Abstracts. 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2017, p.24
119. K.Szczepanowicz, G.Para, L.Szyk-Warszyńska, K.A.Wilk, P.Warszyński "Effect of Cationic Surfactant Structure on Formation of Complexes with Oppositely Charged Polyelectrolytes", Conference Handbook. 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017, P2-12
120. K.Szczepanowicz, P.Piechota, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Containing Iron Oxide Nanoparticles as MRI Detectable Drug Delivery System", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Microencapsulation, Faro 2017, p.106
121. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, T.Kruk, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules for Biomedical Application", Conference Handbook. 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017, P5-73
122. K.Szczepanowicz, W.Swiątek, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Theranostic Polyelectrolyte Nanocapsules", Book of Abstracts. 9th Int. Conf. on Nanomaterials - Research & Application, Brno 2017, p.60
123. S.Szczerkowska, A.Wiertel, J.Zawała, E.Larsen, P.B.Kowalczyk "Kinetics of Froth Flotation of Naturally Hydrophobic Solids with Different Shapes", Proc. Flotation 2017 Conf., Capetown 2017
124. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "UDA-Loaded Nanoparticles as Drug Delivery System for the Treatment of Neurodegenerative Diseases", Book of Abstracts. Int. CECAM-Workshop "Tackling complexity of the nano/bio interface – computational and experimental approaches", Bremen 2017

125. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, W.Lasoń, P.Warszyński "PCL-Based Nanoparticles as Potential Candidate for Drug Delivery to the Central Nervous System", Conference Handbook. 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017, P5-74
126. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, W.Lasoń, P.Warszyński "Synthesis of the Polymer-based Nanoparticles for Biomedical Application", Book of Abstracts. 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sandomie 2017, p.27
127. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Biopolymer-based Nanocapsules as Universal Drug Delivery System for Hydrophobic Substances", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Microencapsulation, Faro 2017, p.107
128. M. Szczech, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "The polymer-based complexes as non-viral vectors for gene delivery", Conference Handbook. 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017, P1-31
129. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polymeric Nanocarriers Modified by Layer by Layer Approach for Theranostic Application", Book of Abstracts. 9th Int. Conf. on Nanomaterials - Research & Application, Brno 2017, p.59
130. I.Szewczyk, R.Kosydar, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz, P.Natkański, P.Kuśtrowski "Selective Hydrogenation of Furfural over Palladium Supported on Mesoporous Carbons", Book of Abstracts, 7th Asia-Pacific Congr. on Catalysis, Mumbai 2017
131. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, L.Matachowski "Chaos in Oscillatory Recombination of Hydrogen and Oxygen on Pd-Based Catalysts", Book of Abstracts, 4th Borekov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017, p.181 [ISBN 978-5-906376-16-9]
132. T.Szumelda, R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, W.Rojek, E.Bielańska, R.Tokarz-Sobieraj, T.Machej, M.Witko, A.Drelinkiewicz "A Role of Au-Content in Performance of Pd-Au/SiO₂ and Pd-Au/Al₂O₃ Catalyst in the Hydrogen Oxidation Reaction. The Microcalorimetric and DFT Studies", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.244 [ISBN 978-83-60514-27-6]
133. W.Świątek, K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Films as the 'Antifouling' Coatings", Book of Abstracts. Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland 2017, Poznań 2017, p.49
134. W.Świątek, K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Modified Polyelectrolyte Multilayer Films as the 'Antifouling' Coatings Preventing Non-specific Proteins Adsorption", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, S17K05

135. L.Szyk-Warszyńska, K.Pamin, J.Połtowicz, P.Warszyński "Ellipsometry for Investigation of Optical Properties of Tetrasulphonated Copper Phthalocyanine", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.270 [ISBN 978-83-60514-26-9]
136. M.Ślęzak, T.Ślęzak, P.Dróżdź, K.Matlak, J.Korecki "Adsorption Induced in Plane Magnetic Anisotropy in Epitaxial bcc Co/Fe Films", Book of Abstracts. 62nd Annual Conf. on Magnetism and Magnetic Materials, Pittsburgh 2017, p.666
137. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Stability and Adsorption Properties of Polyelectrolyte on the Hydrophilic and Hydrophobic Surfaces", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.50 [ISBN 978-83-60514-26-9]
138. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Negatively Charged Protein Adsorption to Negatively Charged Surface", Mater. ARCHIE-WeSt Users' Forum, Strathclyde 2017
139. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Negatively Charged Protein Adsorption to Negatively Charged Surface. Molecular Dynamics Case Study of BSA Adsorption on Silica", Mater. CCP5 Annual General Meeting 'Materials Modelling: Simulation Meets Experiment', Strathclyde 2017
140. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oxygen Adsorption and Activation on Metal Center in Modified Keggin Anion. DFT Calculations", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.160 [ISBN 978-83-60514-27-6]
141. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "The Impact of Geometric Environment on Properties of Co Cation in Heteropolyacids Systems. DFT Cluster Model Studies", Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.246 [ISBN 978-83-60514-27-6]
142. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Właściwości heteropolikwasów o strukturze anionów Keggina modyfikowanych w pozycji atomu addenda", Materiały Zjazdowe. 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017, p.426
143. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik "Cu Complexes with Various Solvents", Book of Abstracts. Int. Workshop on Bioinorganic Redox Control 'Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection' (K.Śpiewak, ed.), Kraków 2017, p.92 [ISBN 978-83-65644-24-4]
144. A.Wiertel, C.Karaguzel, J.Zawała, O.Sahbaz, K.Małyś "Effect of Mixed Cationic and Non-Ionic Surface-active Substances on Kinetics of Bubble Attachment and Quartz Flotation", Book of Abstracts. 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017, A8
145. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, D.Rutkowska-Żbik "Oxygen Activation on Metal-Oxide Surfaces", Book of Abstracts, 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017, p.13 [ISBN 978-5-906376-16-9]

146. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, M.Szaleniec, R.Grybos "Role of Molybdenum in Hetero, Homo, and Enzymatic Catalysis: Selected Examples Studied by Theory Approach", Book of Abstracts. 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017, part Keynote Lecture
147. M.Wlodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, S.Kereiche, L.Kovacik, P.Warszyński "Incorporation of Quantum Dots into Lipid Bilayers Supported on Polyelectrolyte Cushions", Book of Abstracts. Int. CECAM-Workshop 'Tackling complexity of the nano/bio interface – computational and experimental approaches', Bremen 2017
148. M.Wlodek, A.Slastanova, L.Islas, L.Zhou, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński, W.H.Briscoe "Structural Evolution of POPC/POPE Supported Lipid Bilayers Intercalated with Quantum Dots", Conference Handbook. 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
149. J.Zawała, A.Niecikowska "Automatic Single Bubble Generator with Adsorption Time Control", Book of Abstracts. 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017, A27
150. M.Zimowska, J.Gurgul, L.Lityńska-Dobrzyńska, R.P.Socha, K.Łątka "Surface Nanostructures as the Effect of Crystalline-amorphous Porous Clay Heterostructures Functionalization", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, pp.261-262 [ISBN 978-83-60514-26-9]
151. M.Zimowska, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka "Kanemit oraz jego zanieczyszczenia - badania XRD i FTIR", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.263 [ISBN 978-83-60514-26-9]
152. M.Zimowska, H.Pálková, D.Duraczyńska, L.Lityńska-Dobrzyńska, G.Mordarski, L.Jankovič, J.Madejová, E.M.Serwicka "Nanocząstki Ru immobilizowane na organicznych pochodnych minerałów ilastych jako katalizatory uwodornienia 2-butanonu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, pp.27-28 [ISBN 978-83-60514-26-9]
153. A.Żelazny, K.Samson, A.Kornas, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, W.Rojek, D.Rutkowska-Żbik "Hydrogenolysis of Glycerol over Copper and Copper-silver Based Catalysts: Ru and Ce as Promoters", Book of Abstracts. 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017, p.319
154. A.Żelazny, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas, J.Podobiński, D.Rutkowska-Żbik "Wpływ Ce i Ru jako promotorów katalizatorów miedziowych w reakcji hydrogenolizy glicerolu", Mater. 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2017, p.26 [ISBN 978-83-60514-26-9]

PRACE W DRUKU

1. Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Dąbkowska, M.Kujda-Kruk "Albumin Adsorption at Solid Substrates: A Quest for a Unified Approach" J. Colloid Interface Sci., (2018)
2. A.Brzyska, W.Płaziński, K.Woliński "Force-induced Structural Changes in Non-sulfated Carrageenan Based Oligosaccharides – a Theoretical Study", Soft Matter, (submitted)

3. D.K.Chlebda, P.Stachurska, R.J.Jędrzejczyk, Ł.Kuterasiński, A.Dziedzicka, S.Górecka, L.Chmielarz, J.Łojewska, P. Starz, J.Jodłowski "DeNOx Abatement over Sonically Prepared Iron Substituted Y, USY and MFI Zeolite Catalysts in Lean Exhaust Gas Conditions", *Nanomater.*, 2018
4. P.Drzewicz, G.Nałęcz-Jawecki, A.Smoliński, M.Krzan, A.Starzycka "Evaluation of Thermal Treatment of Oil Containing Drilling Waste from Shale Gas Exploration in Poland", *Int. J. Environ. Sci. Technol.*, submitted 18th October 2017,
5. B.Jachimska, S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, T.Luxbacher "Adsorption Effectiveness of β -Lactoglobulin onto Gold Surface Determined by Quartz Crystal Microbalance", *Bioelectrochem.*, 2018
6. M.Krzan, A.Kulawik-Pióro, B.Tyliszczak "Foams Stabilized by Particles", in: "Foam Films and Foams: Fundamentals and Application" (D.Exerowa, G.Gochev, D.Platikanov, L.Liggieri, Miller, eds.), 'Progress in colloids and Interfacial Science', in preparation,
7. M.Mosiąlek, A.Michna, M.Dziubaniuk, E.Bieleńska, A.Kežionis, T.Šalkus, E.Kazakevičius, B.Bożek, A.Krawczyk, J.Wyrwa, A.F.Orliukas "Composite Cathode Material LSCF-Ag for Solid Oxide Fuel Cells Obtained in One Step Sintering Procedure", *Electrochim. Acta*,
8. A.Pomorska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska "Kinetics of Human Serum Albumin Adsorption at Silica Sensor Unveiling Dynamic Hydration Function", *Colloids Surf. A*, (2018)
9. P.Rejmak, A.Śtepiński, J.Datka, E.Broclawik "Fine Speciation of Active Sites in Zeolites by Probe Molecules: Dynamics and IR Frequencies", *Int. J.Quant.Chem.*,
10. K.Woliński, A.Brzyska "Theoretical Studies of the Pyranose Ring under Mechanical Stress", *New J. Chem.*, (submitted)

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. "XLIX Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, XVLIX Polish Annual Conference on Catalysis", 15-17.03.2017, Kraków (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp. 279 [ISBN 978-83-60514-26-9]
2. Book of Abstracts. 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis", September 3-8,2017, Krakow, Poland. Book of Abstracts (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2017, pp.263 [ISBN 978-83-60514-27-6]

EDYTORSTWO MONOGRAFII

1. "Innovation & Impact. Special Issue 1: The Cambridge and London Innovation Ecosystem" (G.Liskiewicz, B.Jachimska, K.Zapadka, eds.), Innovation & Impact, Warszawa 2017, pp.116 [ISBN 978-83-65644-32-9]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY UDZIELONE

1. K.Pamin, J.Połtowicz "Sposób utleniania fenolu do katecholu i hydrochinonu", Polish Patent, PL 228906 (18.12.2017)
2. A.Rugor, M.Szaleniec, T.Janeczko, M.Dymarska, E.Kostrzewa-Susłow "Sposób wytwarzania propionianu androst-1,4-dien-3-on-17-olu", Polish Patent, PL 228517 (24.11.2017)
3. A.Rugor, M.Szaleniec, T.Janeczko, M.Dymarska, E.Kostrzewa-Susłow "Sposób wytwarzania octanu androst-1,4,6-trien-3-on-17-olu", Polish Patent, PL 228070 (21.09.2017)
4. A.Rugor, M.Szaleniec, T.Janeczko, M.Dymarska, E.Kostrzewa-Susłow "Sposób wytwarzania 17a-metyloandrost-1,4-dien-3-on-17-olu", Polish Patent, PL 228071 (21.09.2017)
5. M.Szaleniec, A.Rugor, A.Dudzik, M.Tataruch, K.Szymańska, A.Jarzębski "Sposób otrzymywania 25-hydroksyloowanych pochodnych steroidowych, w tym 25-hydroksy-7-dehydrocholesterolu", Polish Patent, PL 226816 (24.02.2017)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

1. J.Barbasz, T.Witko, Z.Baster "Metoda wyznaczania stałej siłowej dźwigni typu 'colloidal probe' dla mikroskopu sił atomowych", zgłoszenie patentowe RP, P.422059 (28.06.2017)
2. B.Jachimska, Z.Adamczyk "Wiskozymetr kapilarny grawitacyjny", zgłoszenie patentowe RP, P.422641 (25.08.2017)

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH 2017

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z.Adamczyk "Nanopraticle Mono- and Bilayers: Formation, Stability, Applications", 7th Int. Colloids Conf., Sitges, Barcelona 2017
2. T.Borowski, A.Mińczewska, Z.Wojdyła, A.Wójcik, M.Quesne "Mechanisms of Mononuclear Nonheme Enzymes Studied with Computational Methods", Enzymes, Coenzymes & Metabolic Pathways Gordon Research Conf.: Emerging Methods and Concepts to Advance Enzyme Chemistry in Biology, Waterville Valley NH 2017
3. T.Borowski, A.Mińczewska, Z.Wojdyła, A.Wójcik, M.Quesne "Mechanisms of Redox-active Enzymes Studied with QM/MM (and other) Method(s)", MGMS Int. Meeting 'QM/MM Methods and Applications', Manchester 2017
4. E.Broclawik, A.Stepniewski, M.Radon "Spin Status and Zeolitic Environment as Factors Controlling Electron Density Transfer for Co(II)-NO Adducts in Zeolites: WF, DFT and Periodic Modeling", 25th Int. Conf. on Current Trends in Computational Chemistry (CCTCC), Jackson MI 2017
5. B.Jachimska "Self-Assembling Behavior of Proteins: Effect of the Interaction between Protein and Surface", Konf. 'Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing', Żelechów 2017
6. J.Korecki "PEEM/XAS at Solaris is Oncoming", Science@CERIC Workshop, Hermagor-Presegger See 2017
7. M.Kowacz, P.Warszyński "Protein Structural Dynamics and Interactions Modulated by Infrared Light", 12th Conf. on the Physics, Chemistry and Biology of Water, Sofia 2017
8. M.Kowacz, P.Warszyński "Infrared Spectroscopy Study on the Effect of Light on protein Structure and Interactions. Possible Role of Nanobubbles", 7th Visegrad Symp. on Structural Systems Biology, Nove Hradky 2017
9. R.Kozłowski "Acoustic Emission as a Tool to Inform Quantitative Assessment of Climate-induced Damage Risk", Getty Conservation Institute Workshop 'Acoustic Emission Experts Meeting', Los Angeles 2017
10. R.Kozłowski "Leonardo da Vinci 'Lady with an Ermine' - Image and Matter", Conf. 'Chemistry - a New Opening', Kraków 2017
11. R.Kozłowski "Dylemat plus/minus – regulacja klimatu i energooszczędność w Galerii Sztuki Polskiej XIX wieku Muzeum Narodowego w Krakowie w Sukiennicach", 14 Ogólnopolska Konf. 'Problemy jakości powietrza wewnętrznego w Polsce', Warszawa 2017
12. W.Łasocha A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, P.Goszczycki, K.Ostrowska, M.Oszajca, W.Macyk, J.Kuncewicz "X-Ray Powder Diffraction Structural Studies of Lithol Red Pigments", 24th Congr. of Int. Union of Crystallography, Hyderabad 2017

13. A.Pajor-Świerzy "Synthesis and Stabilization of Metal Nanoparticles for Conductive Inks", CoWet Winter School, Saloniki 2017
14. A.Pajor-Świerzy, Y.Farray, A.Kamyshny, S.Magdassi "Synthesis and Applications of core@shell Metal Nanoparticles", Summer School 'Nanomaterials: Formation and Applications', EU programme 'Complex Wetting Phenomena', Jerusalem 2017
15. A.Pajor-Świerzy, A.Kamyshny, S.Magdassi "Interaction of Nanoparticle-based Conductive inks with Solid substrates", CoWet Final Meeting, Darmstadt 2017
16. W.Płazinski "Simulations of Carbohydrates: Beyond Standard Molecular Dynamics", Int. Conf. on Computational Modeling & Simulation ICCMS-2017, Colombo 2017
17. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, Z.Kaszowska, W.Łasocha "Physicochemical Study of Cadmium Yellow from Historic Pigments' Collections", 6th Interdisciplinary ALMA Conf. & 2nd CrysAC Workshop, Brno 2017
18. D.Rutkowska-Żbik "Theoretical Modelling of Catalytic Reactions", Book of Abstracts, 4th Anatolyan School on Catalysis on Development of Catalysis for Green & Sustainable Technologies, Turkish Catalysis Society, Izmir 2017
19. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Aromatyzacja metanu na MoO₃/ZSM-5: Badania DFT", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
20. E.M.Serwicka "Clays in the Design of Combustion Catalysts", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
21. E.M.Serwicka "Combustion Catalysts Based on Layered Minerals", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
22. M.Strojecki "Principles of AE, the Technique and Its Application to Monitoring of Art Objects in Museums", Getty Conservation Institute Workshop 'Acoustic Emission Experts Meeting', Los Angeles 2017
23. M.Szaleniec, A.Rugor, M.Tataruch, J.Heider "Molybdenum Oxidoreductases - Regio- and Enantioselective Hydroxylation of Organic Compounds", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
24. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Właściwości heteropolikwasów o strukturze anionów Keggina modyfikowanych w pozycji atomu addenda", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
25. P.Warszyński "Functional Polyelectrolyte Membranes and Nanocapsules", Summer School 'Nanomaterials: Formation and Applications', EU programme 'Complex Wetting Phenomena', Jerusalem 2017
26. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, D.Rutkowska-Żbik "Oxygen Activation on Metal-Oxide Surfaces", 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017

27. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, M.Szaleniec, R.Gryboś "Role of Molybdenum in Hetero, Homo, and Enzymatic Catalysis: Selected Examples Studied by Theory Approach", 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017

REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z.Adamczyk "Monowarstwy nanocząstek na powierzchniach stałych: mechanizm tworzenia, stabilność, zastosowania", Konf. FGF 'Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne', Lublin 2017
2. Z.Adamczyk "Adsorption mechanisms of nanoparticles and proteins", 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2017
3. Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas, D.Lupa "Oksydacyjne roztwarzanie nanocząstek srebra - nowy model kinetyczny", Konf. FGF 'Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne', Lublin 2017
4. A.Biessikirski, Ł.Kuterasiński, J.Pyra, M.Dworzak "Porównanie właściwości topograficznych i morfologicznych materiałów wybuchowych emulsyjnych otrzymanych na bazie wodnego roztworu saletry amonowej oraz RSM", 14th Int. Conf. 'Explosives Research - Application - Safety' IPOEX 2017, Ustroń 2017
5. A.Biessikirski, Ł.Kuterasiński, J.Pyra, M.Dworzak, M.Twardosz "Właściwości topologiczne oraz morfologiczne materiałów wybuchowych na bazie nawozów mineralnych", Szkoła Górnictwa Odkrywkowego, Kościelisko 2017
6. N.Blades, M.Strojecki "Acoustic Emission Monitoring of Baroque Furniture as a Diagnostic Tool for the Introduction of Environmental Control to a Historic House", Conf. 'Preventive Conservation in Historic Houses and Palace-Museums: Assessment Methodologies and Applications', Versailles 2017
7. A.Bratak-Skicki, A.Brzeska, C.C.Dupont-Gillain "Selective Protein Adsorption on Mixed PEO/PAA Polymer Brushes Studied by Time-of-Flight Ion Mass Spectrometry and Gel Electrophoresis", 21st Int. Conf. on Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS21, Kraków 2017
8. E.Broclawik, K.Góra-Marek, M.Radoń, T.Bucko, A.Stępniewski "The Dependence of N–O Activation by Co(II) Sites in Zeolites upon Ammonia Pretreatment: IR Spectroscopy, DFT and ab initio Molecular Dynamics Study", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
9. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radon "Controlling Electron Density Transfer by Spin Status and Environment for Co(II)-NO Adducts in Zeolites: WF, DFT and Periodic Modeling", 15th Central European Symposium on Theoretical Chemistry CESTC, Wisła 2017
10. E.Cichoń, J.Staroń, J.Dąbrowski, M.Guzik "Otrzymywanie i zastosowania estrów laktozy", Ogólnopolska Konf. Naukowa 'Zrozumieć Naukę', Łódź 2017

11. M.Duda, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Symmetry Analysis of Geometric Patterns from the Castle in Kórnik (Poland)", 6th Interdisciplinary ALMA Conf. & 2nd CrysAC Workshop, Brno 2017
12. A.Forczek-Sajdak, D.Białek-Kostecka, Z.Kaszowska, E.Jarek, M.Kot, J.Bagniuk, M.Walczak, K.Molga, J.Skrzelowska "The Impact of Synthetic Polymers Used for Wall Painting Consolidation in Poland", 11 Konf. Polskiego Towarzystwa Ceramicznego oraz Polsko-Słowacko-Chińskie Sem. na temat ceramiki zaawansowanej oraz zastosowania nowoczesnych metod badania ceramiki w badaniach archeologicznych oraz ochronie zabytków, Zakopane 2017
13. A.Forczek-Sajdak, Z.Kaszowska, D.Białek-Kostecka, E.Jarek, M.Kot, J.Bagniuk, M.Walczak, K.Molga, J.Skrzelowska "Wall Painting Consolidation in the Polish Conservation Practice. Needs and Challenges", 6th Interdisciplinary ALMA Conf. & 2nd CrysAC Workshop, Brno 2017
14. M.Gackowski, B.Sulikowski, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, K.Tarach, S.Jarczewski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchical Zeolites FAU: Porosity, Acidity and Catalytic Properties", 21st Zeolite Forum, Boszkowo 2017
15. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, B.Sulikowski, J.Datka "IR and NMR Studies of Hierarchical Zeolites Y", 14th Int. Conf. of Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska 2017
16. A.Kazmierczuk, P.Lisowski, P.Kowalik, K.Antoniak-Jurak, E.Serwicka-Bahranowska, I.S.Pięta "Waste 2 Fuel Catalyst and Process Development for Waste Biomass Valorisation", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
17. M.Kołodziej, E.Lalik, T.Szumełda, R.Kosydar, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "A Role of H_xMoO_3 (H_xWO_3) in the Pd Catalysts in Activity/selectivity Control for Hydrogenation of Unsaturated Aldehydes", 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017
18. P.Komorek, K.Tokarczyk, B.Jachimska "Stabilność konformacyjna układów biopolimerowych na powierzchniach metalicznych w zastosowaniach biomedycznych", Międzyuczelniana Konf. Zaawansowanych Materiałów i Nanotechnologii, Kraków 2017
19. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Badanie mechanizmu desorpcji nanocząstek metalicznych z krawędzi nanorurek węglowych przy użyciu modelowania molekularnego", Konf. FGF 'Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne', Lublin 2017
20. A.Kornas, M.Śliwa, K.Samson, R.Grabowski, M.Ruggiero, K.Góra-Marek, D.Rutkowska-Żbik "Hydrogenation of CO_2 to Methanol: Influence of Polymorphic ZrO_2 Phases and Copper Electronic State on Activity of Cu/ ZrO_2 Catalyst", 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017
21. A.Kornas, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.Miąsik, D.Duraczyńska, D.Rutkowska-Żbik, R.Grabowski "Wpływ metody syntezy i dodatku heteropolikwasów na aktywność katalizatorów hybrydowych w reakcji otrzymywania dimetyloeteru (DME)", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017

22. M.Kowacz, P.Warszyński "Infrared Light as a Remote Physical Trigger to Affect Protein Conformational Fluctuations, Adhesion and Cohesion Behaviour", 2nd Int. Congr. in Health Sciences Research: Towards Innovation and Entrepreneurship, Covilha 2017
23. R.Kozłowski "Dylemat plus/minus - ocena zagrożeń obiektów zabytkowych przez wahania parametrów klimatu", Warsztat Muzeum Narodowego w Krakowie i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów 'Profilaktyka konserwatorska – przeciwdziałanie zagrożeniom kolekcji muzealnych', Kraków 2017
24. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, S.Kudłacik-Kramarczyk, A.Drabczyk, B.Tyliszczak, L.Szyk-Warszyńska, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, D.Exerow, "Stable and Easy Biodegradable Particle Stabilized Foams", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
25. A.Kupczak "HERIe - oprogramowanie do oceny zagrożenia drewna polichromowanego przez fluktuacje wilgotności", Warsztat Muzeum Narodowego w Krakowie i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów 'Profilaktyka konserwatorska – przeciwdziałanie zagrożeniom kolekcji muzealnych', Kraków 2017
26. A.Kupczak "HERIe - oprogramowanie do ilościowej oceny fizycznego zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania parametrów klimatu", Warsztat Muzeum Narodowego w Krakowie i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów, Warszawa 2017
27. A.Kupczak, R.Kozłowski "Dyfuzja i sorpcja pary wodnej w materiałach i obiektach papierowych", 17 Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków', Warszawa 2017
28. Ł.Kuterasiński, M.Gackowski, B.Sulikowski, J.Podobiński, K.Tarach, S.Jarczewski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne hierarchicznych zeolitów Y otrzymanych metodą desilikacji", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
29. M.Lewandowski, E.Madej, Z.Miłosz, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Hermanowicz, N.Spiridis, J.Korecki, S.Jurga, F.Stobiecki "Modyfikacja struktury i właściwości elektronowych epitaksjalnego grafenu na Ru(0001) poprzez interkalację", 8 Krajowa Kon. Nanotechnologii, Łódź 2017
30. M.Lewandowski, E.Madej, Z.Miłosz, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Hermanowicz, N.Spiridis, J.Korecki, S.Jurga, F.Stobiecki "Intercalation of Graphene on Ru(0001): Possible Mechanisms", European Conf. Physics of Magnetism PM'17, Poznań 2017
31. D.Lupa, Z.Adamczyk "Synthesis and Properties of Colloidal Polymer Carriers", 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2017
32. D.Lupa, Z.Adamczyk "Synteza i właściwości polimerowych nośników koloidalnych", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
33. J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, A.Pomorska, M.Oćwieja "Kinetyka tworzenia biwarstw nanocząstek złota o kontrolowanych właściwościach", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 17.09 - 21.09.2017, Wrocław

34. D.Majda, A.Bhattacharai, J.Riikonen, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J. Töyräs, V.-P. Lehto "Characterization of Cartilage Porosity with NaCl Thermoporometry. New Approach to Determine Cartilage Pore Size Distribution: NaCl - Thermoporometry", Conf. of Central and Eastern European Committee for Thermal Analysis and Calorimetry CEEC-TAC4, Kishinev 2017
35. D.Majda, A.Bhattacharai, J.Riikonen, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Töyräs, V.-P.Lehto "New Approach to Determine Cartilage Pore Size Distribution: NaCl - Thermoporometry", 21st Zeolite Forum, Boszkowo 2017
36. J.Miąsik, W.Rojek, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik, S.Dźwigaj "Katalizatory niklowe i miedziowe na nośnikach mezoporowatych w procesie uwodorniania alkoholu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu i furanu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
37. J.Miąsik, W.Rojek, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik, S.Dźwigaj "Zeolit BEA dotowany niklem i miedzią w reakcji uwodornienia alkoholu i aldehydu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu i furanu", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
38. P.Michorczyk, E.Hędrzak, A.Węgrzynowicz, R.Rachwalik, B.Sulikowski "Application of 3D Printing for Preparation of Monolithic Catalysts", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
39. M.Oćwieja, A.Barbasz "Cytotoksyczność nanocząstek srebra biofunkcjonalizowanych cysteiną", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
40. M.Oćwieja, A.Barbasz, M.Roman "Cytotoksyczność nanocząstek srebra o zróżnicowanych właściwościach powierzchniowych oraz kontrolowanym profilu uwalniania jonów srebra", 8 Krajowa Kon. Nanotechnologii, Łódź 2017
41. M.Oćwieja, A.Gorczyca, E.Pociecha, A.Barbasz, B.Kreczmer "Modelowanie właściwości powierzchniowych nanocząstek srebra w celu poprawy ich użyteczności", Konf. 'Dziś i jutro fitopatologii', Olsztyn 2017
42. M.Oszajca, W.Łasocha "Rentgenowska dyfraktometria proszkowa jako wsparcie codziennej pracy chemika", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
43. A.Pajor-Świerzy, Y.Farray, A.Kamyshny, S.Magdassi "Air-stable Copper-silver Core-shell Particles as Component of Conductive Inks", 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2017
44. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Optimization of Methods of Synthesis of Nickel NPs as the Core of Bimetallic Structure", 9th Int. Conf. on Nanomaterials - Research and Application, Nanocon 2017, Brno 2017
45. H.Palkova, M.Zimowska, L.Jankovic, E.M.Serwicka, J.Madejova "Thermo-IR Spectroscopy in the Study of Montmorillonite Modified with Tetrabutyl-Ammonium and -Phosphonium Cations", 16th 16th Int. Clay Conf. ICC 2017, Granada 2017

46. T.Pańczyk "Molecular Dynamics Modeling of Anticancer Drugs Release in Response to Acidic Microenvironment of Tumor Tissue", Int. Conf. in Nanotechnology, Biotechnology and Spectroscopy, ICNBS Egypt 2017, Giza 2017
47. T.Pańczyk, P.Wolski, Ł.Kończak "Molecular Dynamics Design of Carbon Nanotube Based, Stimuli Responsive, Drugs Carriers", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland 2017, Poznań 2017
48. T.Pańczyk, P.Wolski, M.Pańczyk "Funkcjonalizowana nanorurka węglowa jako czuły na pH i pole magnetyczne nośnik leków. Badanie metodą dynamiki molekularnej", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
49. N.Piergies, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Monitoring of the Adsorption Process of the Anticancer Drug erlotinib onto Potential Colloidal Nanocarriers", 52 Zakopane School of Physics, Zakopane 2017
50. N.Piergies, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Adsorption Geometry Variations of the Anticancer Drug onto Potential Colloidal Nanocarriers", 14th Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska 2017
51. E.Pięta, C.Paluszkiwicz, M.Oćwieja, W.M.Kwiatek "Surface-enhanced Vibrational Spectroscopy in the Search of Effective Nanosensors", 52 Zakopane School of Physics, Zakopane 2017
52. E.Pięta, N.Piergies, M.Oćwieja, H.Domin, C.Paluszkiwicz, E.Bielańska, W.M.Kwiatek "Monitoring the Interfacial Behavior of LuAA33810 after Conjugation with Gold Nanoparticles: SERS and SEIA Studies", 14th Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska 2017
53. J.Piotrowska, R.Karcz, E.Bielańska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Nattich-Rak, M.Krzan, E.M.Serwicka "Synthetic and Post-synthetic Modifications of Mg/Al Hydrotalcite-like Materials Used as Catalyst for Baeyer-Villiger Oxidation of Cyclohexanone with H₂O₂", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
54. A.Płazińska, W.Płaziński "Enhanced-sampling Simulations for Studying the Functionality of the beta2-Adrenergic Receptor", Sem. 'Biologia Strukturalna', Lublin 2017
55. A.Płazińska, W.Płaziński "Symulacje typu enhanced-sampling w badaniach układów biomolekularnych", Sem. 'Biologia Strukturalna', Lublin 2017
56. A.Płazinska, W.Płazinski, M.Koliński "Binding Affinities of Gi and Gs Proteins to the b2-Adrenergic Receptor: Insights from the Coarse-grained Molecular Dynamics Simulations", Int. Conf. on Computational Modeling & Simulation ICCMS-2017, Colombo 2017
57. W.Płazinski "Recent Advances in Modeling of Ring Distortion in Hexopyranoses", 17th European Carbohydrate Symp. EUROCARB 2017, Barcelona 2017

58. S.Przemieniecki, T.Kurowski, A.Gorczyca, M.Oćwieja "Zastosowanie nanocząstek srebra i tytanu oraz fungicydów na bazie mankozebu przeciwko sprawcom mokrej zgnilizny bulw ziemniaka rodzaju *Pectobacterium*", Konf. 'Dziś i jutro fitopatologii', Olsztyn 2017
59. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, S.Mordalski, M.Szaleniec "Reaction Mechanism of Sterol Hydroxylation by Steroid C25 Dehydrogenase, 10th Molybdenum and Tungstate Enzyme Conf., Santa Fe 2017
60. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, E.Niedziałkowska, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Reaction Mechanism of Sterol Hydroxylation by Steroid C25 Dehydrogenase: Homology Model, Reactivity and Isoenzymatic Diversity", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
61. D.Rutkowska-Żbik, Ł.Orzeł, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Transmetallation of Porphyrinoids – Insights from DFT Studies", Workshop CAT-ICBS 2017 'Catalysis with Ions, Complexes, Biological Systems, Clusters and Surfaces', Rende 2017
62. R.P.Socha, P.Panek, M.Juel, P.Zięba, I.Kaus, P.Warszyński "'Ogniwa typu dwustronnego jako efekt projektu InlinePV (Bifacial Cells as a Result of InlinePV Project)", 7 Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna elektronika – perspektywy rozwoju', Świeradów-Zdrój 2017
63. K.Sofińska, M.Guzik "Structure Topography and Local Mechanical Properties of PHA and PLA for Medical Applications", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland 2017, Poznań 2017
64. A.van der Straeten, A.Bratak-Skicki, C.C Dupont-Gillain "Polyelectrolyte Interactions to Control and Tune Protein Immobilization at Interfaces. Applications in Biocatalysis and Separation Technology", AVS 64th Int. Symp. & Exhibition, Tampa 2017
65. M.Strojecki, L.Krzemień, A.Kupczak, R.Kozłowski, A.Działo, M.Łukomski, Ł.Bratasz "Direct Tracing of Micro-damage to Support Indoor Climate Management", 3rd Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, Brighton 2017
66. M.Szaleniec, I.Stawoska, A.Dudzik, M.Wasylewski, M.Jemioła-Rzemińska, A.Skoczowski "DFT-based prediction of reactivity of alcohol dehydrogenase", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
67. K.Szczepanowicz, T.Kruk, A.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Pygylated Polyelectrolyte Nanocapsules for Biomedical Applications", 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 201
68. K.Szczepanowicz, W.Swiątek, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Theranostic Polyelectrolyte Nanocapsules", 9th Int. Conf. on Nanomaterials - Research & Application, Brno 2017
69. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polymeric Nanocarriers Modified by Layer by Layer Approach for Theranostic Application", 9th Int. Conf. on Nanomaterials - Research & Application, Brno 2017

70. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, W.Lasoń, P.Warszyński "Synthesis of the Polymer-based Nanoparticles for Biomedical Application", 12 Szkoła Letnia dla Doktorantów oraz Młodych Pracowników Nauki 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 201
71. M.Ślęzak, T.Ślęzak, P.Dróżdź, K.Matlak, J.Korecki "Adsorption Induced in Plane Magnetic Anisotropy in Epitaxial bcc Co/Fe Films", 62nd Annual Conf. on Magnetism and Magnetic Materials, Pittsburgh 2017
72. S.Świątek, R.Stokłosa, B.Jachimska "Samoorganizacja wołowej β -laktoglobuliny na powierzchni złota z zastosowaniem mikrowagi kwarcowej z monitorowaną dyssypacją energii (QCM-D)", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
73. W.Świątek, K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Films as the 'Antifouling' Coatings", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland 2017, Poznań 2017
74. W.Świątek, K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Modyfikacja multiwarstw polielektrolitowych w celu eliminacji adsorpcji białek", Ogólnokrajowa Konf. Naukowa 'Badania Młodych Naukowców', Kraków 2017
75. W.Świątek, K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Modified Polyelectrolyte Multilayer Films as the 'Antifouling' Coatings Preventing Non-specific Proteins Adsorption", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
76. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Stability and Adsorption Properties of Polyelectrolyte on the Hydrophilic and Hydrophobic Surfaces", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
77. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Negatively Charged Protein Adsorption to Negatively Charged Surface", ARCHIE-WeSt Users' Forum, Strathclyde 2017
78. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Negatively Charged Protein Adsorption to Negatively Charged Surface. Molecular Dynamics Case Study of BSA Adsorption on Silica", CCP5 Annual General Meeting 'Materials Modelling: Simulation Meets Experiment', Strathclyde 2017
79. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oxygen Adsorption and Activation on Metal Center in Modified Keggin Anion. DFT Calculations", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
80. M.Tsirigotis-Maniecka, L.Szyk-Warszyńska, R.Gancarz, P.Warszyński, K.A.Wilk "Mikronosniki hydrożelowe dla terapeutycznych substancji pochodzenia roślinnego", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
81. A.Wiertel, C.Karaguzel, J.Zawała, O.Sahbaz, K.Małyś "Effect of Mixed Cationic and Non-Ionic Surface-active Substances on Kinetics of Bubble Attachment and Quartz Flotation", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017

82. M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik, M.Szaleniec, R.Gryboś "Role of Molybdenum in Hetero, Homo, and Enzymatic Catalysis: Selected Examples Studied by Theory Approach", 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017
83. M.Wlodek, A.Slastanova, L.Islas, L.Zhou, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński, W.H.Briscoe "Structural Evolution of POPC/POPE Supported Lipid Bilayers Intercalated with Quantum Dots", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
84. P.Wolski, T.Pańczyk "Teoretyczne badania adsorpcji doksorubicyny i wybranych cząsteczek barwników na powierzchni jednościennych nanorurek węglowych", Konf. FGF 'Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne', Lublin 2017
85. M.Zajac, A.Bianco, E.Busetto, J.Korecki, M.Sikora, M.J.Stankiewicz, M.Ślęzak, A.I.Wawrzyniak "PEEM/XAS Beamline at SOLARIS", EUSpec COST Action WG2-WG5 Meeting 'Recent advances in spectroscopy: experiment and theory', Kraków 2017
86. M.Zajac, T.Giela, J.Korecki, M.Sikora, M.J.Stankiewicz, A.I.Wawrzyniak "Status and First Results of the PEEM/XAS Beamline Commissioning Process", 12th National Symp. of the Synchrotron Radiation Users, KSUPS'17, Gdańsk 2017
87. Y.Zhang, P.Batys, F.Li, J.Lutkenhuas, M.Sammalkorpi "Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Polyelectrolyte Complexes", APS March Meeting, New Orleans 2017
88. Y.Zhang, J.Lutkenhuas, M.Sammalkorpi, P.Batys "Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Polyelectrolyte Complexes", 254th ACS National Meeting, Washington DC 2017
89. Y.Zhang, J.Lutkenhuas, M.Sammalkorpi, P.Batys "The Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Polyelectrolyte Complexes (PECs)", 6th Texas Soft Matter Meeting, Houston TX 2017
90. M.Zimowska, H.Pálková, D.Duraczyńska, L.Lityńska-Dobrzyńska, G.Mordarski, L.Jankovič, J.Madejová, E.M.Serwicka "Nanocząstki Ru immobilizowane na organicznych pochodnych minerałów ilastych jako katalizatory uwodornienia 2-butanonu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
91. A.Żelazny, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas, J.Podobiński, D.Rutkowska-Żbik "Wpływ Ce i Ru jako promotorów katalizatorów miedziowych w reakcji hydrogenolizy glicerolu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
92. A.Żelazny, K.Samson, A.Kornas, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, W.Rojek, D.Rutkowska-Żbik "Hydrogenolysis of Glycerol over Copper and Copper-silver Based Catalysts: Ru and Ce as Promoters", 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017

POSTERY

1. K.Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, A.Michalik-Zym, B.D Napruszewska, M.Nattich-Rak, M.Rogowska, E.M.Serwicka "Influence of Purification Method of Na-Montmorillonite on the Properties of PILC-type and IMEC-type Clay Composites with TiO₂ Nanoparticles", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017

2. A.Barbasz, M.Oćwieja "Wzmocnienie aktywności biologicznej nanocząstek srebra za pomocą metafosforanów nieorganicznych", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
3. S.Basąg, Z.Piwowska, F.Kovanda, K.Pamin, L.Chmielarz "Wieloskładnikowe układy tlenkowe pochodzenia hydrotalkitowego w roli katalizatorów procesu całkowitego utleniania metanolu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
4. P.Batys, Y.Zhang, J.L.Lutkenhaus, M.Sammalkorpi "Water Behaviour Around Intrinsic and Extrinsic Ion Pairs in Hydrated Polyelectrolyte Complexes", 7th Int. Colloids Conf., Sitges, Barcelona 2017
5. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Porównanie morfologii, składu chemicznego i składu fazowego tlenkowych katalizatorów do bezpośredniego rozkładu NO i do utleniania CO wytworzonych na folii ze stali AISI 321", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
6. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz, Ł.Witek "Wpływ temperatury wstępnego utleniania folii ze stali AISI 321 na etap chemicznej modyfikacji powstałej warstwy tlenkowej w syntezie katalizatorów do bezpośredniego rozkładu NO i do utleniania CO", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
7. R.Bonetta, T.Borowski, G.J.Hunter, C.Trinh, T.Hunter "Investigating the Structure of C. Elegans Manganese Superoxide Dismutases by X-Ray Crystallography and Molecular Dynamics Simulations", 7th Scientific Workshop ECOSTBio: Explicit Control over Spin-states in Technology and Biochemistry, Dublin 2017
8. B.Bożek, W.Łasocha "Związki hybrydowe nieorganiczno-organiczne na bazie MoO₃", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
9. B.Bożek, W.Łasocha, P.Neves, A.Valente "Cechy strukturalne polimolibdenianów amin a ich aktywność w procesach utleniania", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
10. B.Bożek, W.Łasocha, A.A.Valente, P.Neves "Hybrid Inorganic-organic Compounds Based on MoO₃", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
11. B.Bożek, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "Nowe polimolibdeniany amino naftalenu i ich testy w katalitycznym utlenianiu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
12. B.Bożek, W.Surga, A.Olech, M.Michalec, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "Nieorganiczne politrimolibdeniany i ich testy w katalitycznym utlenianiu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
13. B.Bożek, W.Surga, A.Olech, M.Michalec, P.Serda, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Łasocha "New Inorganic Trimolybdates and Their Activity in Catalytic Oxidation Processes", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017

14. A.Bratak-Skicki, A.Brzeska, C.C.Dupont-Gillain "Selective Protein Adsorption on Mixed PDMAEMA-PEO Polymer Brushes", Catholic University, Louvain la Neuve 2017
15. M.Chojecki, D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "Chiral Recognition in the Intermolecular Interaction between Carvone and Menthol", 15th Central European Symp. on Theoretical Chemistry CESTC, Wisła 2017
16. M.Chojecki, D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "Chiral Recognition in the Intermolecular Interaction between Carvone and Menthol – Theoretical Study", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
17. A.Drelinkiewicz, E.Bielańska, M.Góral-Kurbiel, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda "Controlling Nanostructure of Bimetallic Pd-M (M = Au, Ir, Pt, Ru) Catalysts Prepared by the Reverse 'Water-in-Oil' Microemulsion Method", 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017
18. P.Dróżdź, M.Ślęzak, K.Matlak, J.Korecki, T.Ślęzak "AFM-FM Phase Transition in Ultrathin FeRh and in FeRh/FM (Fe, Co) Bilayers on W(110) Substrate", European Conf. Physics of Magnetism PM'17, Poznań 2017
19. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko, D.Rutkowska-Żbik "HOOH/OOH⁻ as Oxidant in Porphyrin-catalysed Reactions", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
20. M.Duda, A.Grzesik, P.Serda, M.Oszajca, W.Łasocha "Badania strukturalne połączeń cynku i kadmu z 1,8-diaminonaftalenem metodami dyfraktometrii proszkowej", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
21. M.Duda, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Wpływy orientalne w dziewiętnastowiecznej rezydencji polskiej – studium krystalograficzne", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
22. D.Duraczyńska, R.Socha, U.Filek, A.Bukowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Uwodornienie wybranych ketonów w obecności katalizatora rutenowego osadzonego na żywicy metakrylanowo-styrenowej", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
23. S.Dźwigaj, K.Pamin, J.Połtowicz, S.Basąg "Synthesis of New Organic-Inorganic Hybrid - Physicochemical Characterization and Catalytic Investigations", 3rd Edition of Smart Materials and Surfaces SMS EUROPE 2017 Conf., Paris 2017
24. U.Filek, D.Duraczyńska, D.Mucha "Jednoetapowa synteza octanu etylu w obecności katalizatorów zawierających pallad", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
25. U.Filek, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Heteropolikwasy z różnym jonem centralnym w reakcji konwersji alkoholi Obliczenia DFT vs. eksperyment", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017

26. U.Filek, R.P.Socha, D.Duraczyńska, D.Mucha, K.Tarach, K.Góra-Marek, M.Witko "One-Pot Synthesis of Ethyl Acetate by Oxidation of Ethanol in Gas Phase over Palladium Supported on 12-Tungstophosphoric Acid and its Phosphorus-Tungsten Bronze", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
27. M.Gackowski, B.Sulikowski, M.Hunger "Badania NMR zeolitów desilikonowanych", Konf. Young from Universities, Polytechnics & Polish Academy of Sciences Nuclear Magnetic Resonance, Łódź 2017
28. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, S.Jarczewski, B.Sulikowski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchical Zeolites Y: Catalysts of High Acidity, Mesoporosity and Catalytic Activity", 7th FEZA Conf., Sofia 2017
29. K.Gawęda, A.Płazinska, W.Płazinski "Recent Advances in Modeling of Ring Distortion in Hexopyranoses", CCP5 Summer School 2017 in Molecular Simulation, Lancaster 2017
30. K.Gawęda, A.Płazinska, W.Płazinski "Advances in Modeling of Ring Distortion in Hexopyranoses", Plumed Meeting 2017, Triest 2017
31. K.Gawęda, A.Płazinska, W.Płazinski "Modeling of Ring Distortion in Hexopyranoses", European Conf. on Theoretical and Computational Chemistry 11EUCO-TCC, Barcelona 2017
32. M.Golonka, M.Tataruch, M.Rugierro-Mikołajczyk "Ocena zmian aktywności immobilizowanej alfa-amylazy na podłożu PANI z wykorzystaniem wybranych czynników sieciujących w procesach hydrolitycznych", 3. Konf. Naukowa 'Enzymy w nauce i przemyśle' ENZYMOS, Lublin 2017
33. A.González Guillén, K.Luberda-Durnaś, M.Oszajca, W.Łasocha "Synthesis and Characterization of a New Family Organic-inorganic Hybrid Layered Materials Based on Metal Sulphates and Aromatic Diamines: (diamine)_xM₂(SO₄)₃ (M=Mn,Fe,Co,Ni,Cu; x=1/2, 1)", 24th Congr. of Int. Union of Crystallography, Hyderabad 2017
34. A.González Guillén, K.Luberda-Durnaś, M.Oszajca, W.Łasocha "New Family of Organic-inorganic Hybrid Materials Based on Iron and Nickel Sulphates and Aromatic Diamines", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
35. A.Gorczyca, M.Oćwieja, E.Matras "Ocena właściwości fungistycznych nanocząstek srebra o zróżnicowanych właściwościach", Konf. 'Dziś i jutro fitopatologii', Olsztyn 2017
36. M.Góral-Kurbiel, M.Kołodziej, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, B.Dembińska, P.J.Kulesza, J.Gurgul, E.Bielańska, U.Filek "The Influence of Keggin and Dawson Type Heteropolyacids on Electrocatalytic Activity of Pd,Pt-based Catalysts in Oxygen Reduction Reaction", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
37. M.Grzesiak-Nowak, A.Rafalska-Łasocha, E.Zygier, W.Łasocha "XRPD as an Useful Tool for Investigations of Historic Pigments", 6th Interdisciplinary ALMA Conf. & 2nd CrysAC Workshop, Brno 2017

38. B.Jachimska, P.Komorek, R.Stokłosa, S.Świątek, K.Tokarczyk "Self-Assembling Behaviour of Proteins: from Solution to Surface", Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society", Lyon 2017
39. B.Jachimska "Dendrimers as a Platform for Designing Biologically Active Carriers", Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society", Lyon 2017
40. E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Surface Activity of Hydrolysable Esterquat Surfactants; What Can We Learn from DFT Calculations?", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
41. R.Jędrzejczyk, A.Dziedzicka, D.Chlebda, Ł.Kuterasiński, R.Ważny, M.Śliwa, P.Jodłowski "Spectroscopic and Antimicrobial Characterisation of Ag, Cu, Zn and Combined Bimetal Exchanged Zeolites", 14th Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska 2017
42. P.Jodłowski, I.Czekaj, Ł.Kuterasiński, R.J.Jędrzejczyk, D.Chlebda, M.Sitarz "Comparison of Theoretical and Experimental Studies of SCR deNO_x over Cu-USY Structured Catalyst", 14th Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska 2017
43. S.Kachhap, T.Borowski "Structural Studies of the L-Carbamoylase with Active Site Bound Mono/dinuclear Co²⁺ - Molecular Dynamics Simulations", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
44. R.Karcz, P.Niemiec, K.Pamin, J.Połtowicz, B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, E.M.Serwicka "Aktywność katalityczna heteropolizwiązków dotowanych jonami kobaltu w reakcji utleniania cyklooktanu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
45. A.Kluza, P.Porębski, Z.Wojdyła, E.Niedziałkowska, T.Borowski "Structural Studies of Thebaine 6-O-Demethylase from *Papaver somniferum*", 6th Int. School on Biological Crystallization ISBC, Granada 2017
46. M.Kołodziej, J.C.Colmenares, P.Lisowski, E.Lalik, J.Gurgul, M.Góral-Kurbiel, A.Kornas, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Katalizatory Pd/MoO₃ syntetyzowane nową metodą "Sonophotodeposition"; właściwości fizykochemiczne i katalityczne", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
47. M.Kołodziej, E.Lalik, R.Kosydar, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "A Role of H_xMoO₃ (H_xWO₃) in the Pd Catalysts in Activity/selectivity Control for Hydrogenation of Unsaturated Aldehydes", Jahrestreffen Deutscher Katalytiker, Weimar 2017
48. P.Komorek, I.Brand, B.Jachimska "Determination of the Conformation and Secondary Structure of Proteins in the Adsorbed State: an Important Step Towards biomedical Applications", Bunsentagung 2017, Kaiserslautern 2017
49. P.Komorek, B.Jachimska, I.Brand "Conformational Changes in Bovine Serum Albumin Self-assembled Monolayers", Konf. 'Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing', Żelechów 2017

50. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Duraczyńska, A.Miąsik, D.Rutkowska-Żbik "Katalizatory hybrydowe w reakcji uwodornienia CO₂ do dimetyloeteru (DME)", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
51. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Duraczyńska, D.Rutkowska-Żbik "Synthesis of Dimethyl Ether over Hybrid Catalysts", 13th European Congr. on Catalysis EuropaCat 2017, Florence 2017
52. R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, W.Rojek, T.Szumelda, E.Bielańska, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz "Humidity Induced Deactivation of Alumina and Silica Supported Pd, Pt, Pd-Pt Catalysts in H₂ and O₂ Recombination Reaction for Passive Autocatalytic Recombiners PAR Devices", 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017
53. R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, W.Rojek, T.Szumelda, E.Bielańska, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, A.Drelinkiewicz "Humidity Induced Deactivation of Alumina and Silica Supported Pd, Pt, Pd-Pt Catalysts in H₂ and O₂ Recombination Reaction for Passive Autocatalytic Recombiners PAR Devices", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
54. R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrogen Oxidation on SiO₂ and MoO₃ Supported Bimetallic Pd-Pt Catalysts", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
55. M.Kozieł, K.Nowakowska, M.Gryl, W.Łasocha "Synteza związków nieorganiczno-organicznych opartych na połączeniach metali 3d z melaminą", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
56. M.Krzan "Influence of Wake Presence on Bubble Accelerations and Local Velocities", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
57. M.Krzan, S.Kudlacik-Kramarczyk, A.Drabczyk, E.Jarek, B.Tyliszczak, P.Basarova, R.Miller "Influence of n-Alkanol chain Length on Acceleration, Local and Terminal Velocities of Bubbles", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
58. M.Krzan, S.Kudlacik-Kramarczyk, A.Drabczyk, B.Tyliszczak "Studies of Hydrogel Matrices Based on Polysaccharides", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
59. M.Krzan, E.Rio, W.Drenckhan-Andreatta, D.Langvein "Stability of Whey Protein Foams Generated in Double-syringe Device", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
60. L.Krzemień "Pękanie warstwy malarskiej obrazu panelowego a struktura przyrostów rocznych drewna", 17 Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków', Warszawa 2017
61. Ł.Kuterasiński, P.Jodłowski, A.Dziedzicka, R.Jędrzejczyk, D.Chlebda "Sonically Prepared Fe-MFI and Fe-USY Zeolites as Catalysts for DeNO_x Processes", 14th Int. Conf. on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska 2017

62. E.Lalik, R.Kosydar, M.Kołodziej, J.Gurgul, T.Szumelda, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Efekty termiczne reakcji z udziałem wodoru; wyzwanie dla technologii OZE", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
63. K.Luberda-Durnaś, A.Gonzalez-Guillen, M.Oszajca, P.Konieczny, W.Łasocha "Nanomagnetyki molekularne typu MnSO₄(amina) - synteza, struktura i własności", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
64. D.Lupa, Z.Adamczyk "Monowarstwy nanocząstek złota i srebra na polimerach nośnikach koloidalnych", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
65. J.Maciejewska-Prończuk, A.Pomorska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Kinetyka tworzenia monowarstw i biwarstw nanocząstek złota na powierzchni sensorów", 8. Krajowa Konf. Nanotechnologii, Łódź 2017
66. D.Majda, A.Bhattacharai, J.Riikonen, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Töyräs, V.-P.Lehto "Characterization of Cartilage Porosity with NaCl Thermoporometry", 11th Int. Symp. on the Characterization of Porous Solids OPS-X, Avignon 2017
67. D.Majda, A.Korzeniowska, W.Makowski, B.D.Napruszewska, M.Zimowska "Thermoporometry as a Tool of Characterization Mesoporous Materials, 11th Int. Symp. on the Characterization of Porous Solids OPS-X, Avignon 2017
68. D.Majda, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, W.Makowski "Thermoporometry as a Tool for Characterization of Mesoporous Materials", Conf. of Central and Eastern European Committee for Thermal Analysis and Calorimetry CEEC-TAC4, Kishinev 2017
69. B.A.Matlak, K.Matlak, T.Ślęzak, J.Korecki "Thickness-dependent Spin Reorientation Transition Enhanced by Perpendicular Exchange Bias in Co/CoO(111) Bilayer", 2017 IEEE Int. Magnetism Conf., INTERMAG 2017, Dublin 2017
70. P.Mazalski, A.Maziewski, Z.Kurant, M.O.Liedke, J.Fassbender, J.Ferré, A.Mougin, A.Wawro, L.T.Baczewski, A.Rogalev, F.Wilhelm "Synchrotron Studies of Co Nanostructure Modified by Ion Irradiation", 16th DESY Research Course 2017 'Nanoscience at modern X-ray sources', Hamburg 2017
71. P.Mazalski, R.P.Socha, L.Ohnoutek, L.Beran, Z.Kurant, A.Wawro, J.Fassbender, M.Veis, A.Maziewski "Ion Driven Magnetic and Structural Modifications of Ultrathin Co Films with Various Covers", European Conf. Physics of Magnetism PM'17, Poznań 2017
72. P.Mazalski, J.Sveklo, Z.Kurant, O.M.Liedke, R.P.Socha, A.Wolska, A.Wawro, J.Fassbender, A.Maziewski "Magnetic Properties of Ion Irradiated Co Ultrathin Films with Different Interfaces", 22nd Int. Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions, Dresden 2017
73. A.Micek-Ilnicka, A.Kirpsza, E.Lalik, G.Mordarski "Carbon Nanotubes as a Support of the Heteropolyacids Active Phase in Alcohol Conversion", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017

74. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula, E.Bielańska, W.Rojek, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Composites of Laponite and Mn-Cu-Zr-Ce-Al Hydrotalcites Prepared by Inverse Microemulsion as Catalysts for Combustion of Toluene", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
75. A.Mińczewska, E.Wierus, J.Korecki, T.Makris, T.Borowski "QM/MM Study on the Metal-dependent C-C Bond Cleavage by Acireductone Dioxygenase", 6th Scientific Workshop ECOSTBio: Explicit Control over Spin-states in Technology and Biochemistry, Lisbon 2017
76. G.Mordarski, M.Śliwa, K.Samson "Electrochemical Oxidation of Solid Carbon in Liquid Carbonates", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
77. M.Morga, A.Michna, Z.Adamczyk "Influence of poly(Allylamine hydrochloride) (PAH) Macromolecules on Electrokinetic Properties of Solid Substrates", 12th Int. Symp. on Electrokinetics, Electrosurface Phenomena in Advanced Materials and Soft Matter ELKIN 2017, Dresden 2017
78. M.Morga, A.Michna, Z.Adamczyk "Electrokinetic Studies of Polyelectrolyte/polypeptides Monolayers on Mica", 12th Int. Symp. on Electrokinetics, Electrosurface Phenomena in Advanced Materials and Soft Matter ELKIN 2017, Dresden 2017
79. M.Mosiąlek, P.Nowak, B.Bożek, E.Bielańska, M.Dziubaniuk, J.Wyrwa, A.Kežionis, T.Šalkus, E.Kazakevičius, A.F.Orliukas "Electrical Conductivity of Ceria Based Mixed Oxides Investigated by Broadband Impedance Spectroscopy", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
80. B.Mrugala, E.Niedzialkowska, P.Porebski, T.Borowski, W.Minor "Structure and Characterization Ethylene Forming Enzyme", 47th Mid-Atlantic Macromolecular Crystallography Meeting, Baltimore 2017
81. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk "Adsorpcja nanocząstek metalicznych na powierzchniach mikrosfer polistyrenowych", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
82. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Kąkol, Z.Adamczyk "Adsorpcja albuminy ludzkiej na powierzchniach mikrosfer polistyrenowych", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
83. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Kujda "Określenie mechanizmu adsorpcji mikrosfer polistyrenowych na powierzchniach modyfikowanych albuminą ludzką", 60 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Wrocław 2017
84. M.Oćwieja, J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, M.Roman "Mechanisms and Kinetics of Deposition of Positively Charged Gold Nanoparticles on Silica Sensors", 52 Zakopane School of Physics, Zakopane 2017

85. N.Ogrodowicz, A.Micek-Ilnicka "Właściwości katalityczne heteropolikwasów typu Keggina i Wellsa-Dawsona z różnymi atomami addenda", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
86. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Optimization of Method of Synthesis of Bimetallic Nanoparticles", 2nd Interdisciplinary FNP Conf., Warszawa 2017
87. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, W.W.Kubiak "Mechanism of Hydroxylation of Phenol with Hydrogen Peroxide in the Presence of Glycerol as Alternative Solvent", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
88. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.Serwicka-Bahranowska "Heteropolisole manganu jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do kaprolaktonu tlenem molekularnym", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
89. K.Pamin, J.Połtowicz, E.Tabor, S.Basąg, W.W.Kubiak "Electrochemical and Spectroscopic Study on Three Generations Cobalt Porphyrins", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
90. K.Pamin, J.Połtowicz, R.Tokarz-Sobieraj "Decomposition of Phenol with Metalloporphyrins as Catalysts and Hydrogen Peroxide as Oxidant", Int. Workshop on Bioinorganic Redox Control 'Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection', Kraków 2017
91. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.Serwicka-Bahranowska "Catalytic Activity of Cobalt, Iron and Manganese Keggin-Type Polyoxometalates in Oxidation of Cyclohexanone to Caprolactone", Int. Workshop on Bioinorganic Redox Control 'Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection', Kraków 2017
92. K.Pamin, M.Prończuk, J.Połtowicz, E.Serwicka-Bahranowska "Heteropoly Compounds as Catalysts for Oxidation of Cyclohexanone to ϵ -Caprolactone with Molecular Oxygen", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
93. K.Pamin, E.Tabor, J.Piotrowska, S.Basąg, J.Połtowicz, W.W.Kubiak "Effect of Substituents in Cobalt Porphyrins on Their Catalytic Activity in Cycloalkanes Oxidation with Molecular Oxygen", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
94. J.R.Pantaz, A.Gonzalez-Guillen, M.Oszajca, W.Łasocha "Investigation of New Calcium Dicarboxylates", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
95. K.Pańczyk, W.Płazinski "Ring-inversion Properties of Pyranosides: Beyond Standard Aldohexoses", CCP5 Summer School 2017 in Molecular Simulation, Lancaster 2017
96. K.Pańczyk, W.Płazinski "Pyranose Ring Puckering in Aldopentoses, Ketohexoses and Deoxyaldohexoses. A Molecular Dynamics Study", European Conf. on Theoretical and Computational Chemistry 11EUCO-TCC, Barcelona 2017
97. K.Pańczyk, W.Płazinski "Ring-inversion Properties of Pyranosides: Beyond Standard Aldohexoses", 17th European Carbohydrate Symp. EUROCARB 2017, Barcelona 2017

98. J.Piotrowska, R.Karcz, E.Bielańska, B.D.Napruszewska, E.M.Serwicka "Zastosowanie mikroemulsji w/o do otrzymywania katalizatorów magnezowo-glinowych typu hydrotalkitu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
99. J.Piotrowska, R.Karcz, B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Wpływ anionu międzywarstwowego w strukturze hydrotalkitu na aktywność katalityczną w reakcji utleniania cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
100. W.Płazinski, K.Gawęda "Recent Advances in Modeling of Ring Distortion in Hexopyranoses", 17th European Carbohydrate Symp. EUROCARB 2017, Barcelona 2017
101. S.Przemieniecki, K.Kotlarz, T.Krowski, A.Gorczyca, M.Oćwieja "Wpływ wybranych bakteriostatyków, środków ochrony roślin i nanocząstek srebra na *Pseudomonas* sp. izolowaną z bulwy ziemniaka z objawami zgnilizny", Konf. 'Dziś i jutro fitopatologii', Olsztyn 2017
102. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, M.P.Kruk, W.Łasocha "On the Grounds of Icons from National Museum in Krakow", 24th Congr. of Int. Union of Crystallography, Hyderabad 2017
103. A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Ludwik Marian Chrobak – krystalograf. Wspomnienie w 35 rocznicę śmierci", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017
104. W.Rojek, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Żelazny, A.Kornas, J.Miąsik, D.Rutkowska-Żbik "Badania nad uwodornieniem furfuralu w kierunku furanu i 2-metylofuranu na katalizatorach chromitowych ", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
105. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, A.Kornas, K.Samson, B.Rivas Murias, F.Rivadulla, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Żelazny, D.Rutkowska-Żbik "Physico-chemical Characterization of Cathodic Thin Films on YSZ Solid Oxide Electrolyte for Fuel Cell Applications", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
106. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, A.Kornas, K.Samson, B.Rivas Murias, F.Rivadulla, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Żelazny, D.Rutkowska-Żbik "Fabrication and Examination of Cathodic Thin Films on YSZ Solid Oxide Electrolyte", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
107. A.Rugor, T.Janeczko, M.Guzik, M.Szaleniec "Selective Modifications of Steroids and Sterols by Bacterial Enzymes", 13th Int. Symp. on Biocatalysis and Biotransformations BioTrans 2017, Budapest 2017
108. A.Rugor, A.Wójcik-Augustyn, E.Niedzialkowska, M.Szaleniec "Homology Model, Reactivity and Isoenzymatic Diversity of Steroid C25 Dehydrogenase, a Molybdoenzyme Hydroxylating Sterols and Vitamin D3", 10th Molybdenum and Tungstate Enzyme Conf., Santa Fe 2017
109. P.Serda, M.Duda, W.Nitek, W.Łasocha "Nowe oktamolibdeniany na bazie 1,2-fenylenodiaminy", 59 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2017

110. W.Snoch, J.Staroń, M.Guzik "Novel Halogenated Sugar Esters Derived from Bacterial Polymer Polyhydroxyalkanoate", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland 2017, Poznań 2017
111. R.P.Socha, P.Warszyński "In-line Processing of n+/p and p/p+ Junction Systems for Cheap Photovoltaic Module Production", Polish-Norwegian Research Programme Final Conf., Warszawa 2017
112. K.Sofińska, M.Cieśla, J.Barbasz, E.Gudowska-Nowak "Abnormal Behavior of Rupture Force Distribution in PEI/SiO₂ System", 30th Marian Smoluchowski Symp. on Statistical Physics: on the Uniformity of Laws of Nature, Kraków 2017
113. M.Sroczyk, A.Rugor, M.Hochołowski, M.Oszajca, M.Szaleniec "Enzymatic Oxidative Dehydrogenation of 3-Ketosteroids by cholest-4-en-3-one Δ 1-Dehydrogenase", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
114. M.Sroczyk, A.Rugor, M.Oszajca, M.Szaleniec "Stopped Flow Enzymatic Kinetics of Fad-dependent Oxidation of 3-Ketosteroids", Int. Workshop 'Bioinorganic Redox Control – Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection', Krakow 2017
115. M.Sroczyk, A.Rugor, M.Oszajca, M.Szaleniec "Badanie kinetyki enzymatycznej reakcji utleniania 3-ketosteroidów z udziałem dehydrogenazy FAD-zależnej", Forum Prac Dyplomowych Horyzonty Nauki 2017, Kraków 2017
116. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Formed through Layer by Layer Approach as an Alternative Camptothecin Delivery System", FEBS Congr. Jerusalem 2017
117. K.Szczepanowicz, G.Para, L.Szyk-Warszyńska, K.A.Wilk, P.Warszyński "Effect of Cationic Surfactant Structure on Formation of Complexes with Oppositely Charged Polyelectrolytes", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
118. K.Szczepanowicz, P.Piechota, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Containing Iron Oxide Nanoparticles as MRI Detectable Drug Delivery System", 21st Int. Symp. on Microencapsulation, Faro 2017
119. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, T.Kruk, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules for Biomedical Application", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
120. S.Szczerkowska, A.Wiertel, J.Zawała, E.Larsen, P.B.Kowalczyk "Kinetics of Froth Flotation of Naturally Hydrophobic Solids with Different Shapes", Flotation 2017 Conf., Capetown 2017
121. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "UDA-Loaded Nanoparticles as Drug Delivery System for the Treatment of Neurodegenerative Diseases", Int. CECAM-Workshop 'Tackling complexity of the nano/bio interface – computational and experimental approaches', Bremen 2017

122. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, W.Lasoń, P.Warszyński "PCL-Based Nanoparticles as Potential Candidate for Drug Delivery to the Central Nervous System", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
123. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Biopolymer-based Nanocapsules as Universal Drug Delivery System for Hydrophobic Substances", 21st Int. Symp. on Microencapsulation, Faro 2017
124. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "The Polymer-based Complexes as Non-viral Vectors for Gene Delivery", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
125. I.Szewczyk, R.Kosydar, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz, P.Natkański, P.Kuśtrowski "Selective Hydrogenation of Furfural over Palladium Supported on Mesoporous Carbons", 7th Asia-Pacific Congr. on Catalysis, Mumbai 2017
126. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, L.Matachowski "Chaos in Oscillatory Recombination of Hydrogen and Oxygen on Pd-Based Catalysts", 4th Boreskov Readings Scientific Conf., Novosibirsk 2017
127. T.Szumelda, R.Kosydar, E.Lalik, M.Kołodziej, W.Rojek, E.Bielańska, R.Tokarz-Sobieraj, T.Machej, M.Witko, A.Drelinkiewicz "A Role of Au-Content in Performance of Pd-Au/SiO₂ and Pd-Au/Al₂O₃ Catalyst in the Hydrogen Oxidation Reaction. The Microcalorimetric and DFT Studies", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
128. L.Szyk-Warszyńska, K.Pamin, J.Połtowicz, P.Warszyński "Ellipsometry for Investigation of Optical Properties of Tetrasulphonated Copper Phthalocyanine", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
129. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "The Impact of Geometric Environment on Properties of Co Cation in Heteropolyacids Systems. DFT Cluster Model Studies", 8th World Congr. on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Kraków 2017
130. R.Tokarz-Sobieraj, D.Rutkowska-Żbik "Cu Complexes with Various Solvents", Int. Workshop on Bioinorganic Redox Control 'Implications for Medicinal Chemistry and Environmental Protection' (K.Śpiewak, ed.), Kraków 2017
131. M.Tsirigotis-Maniecka, L.Szyk-Warszyńska, A.Michna, P.Warszyński, K.A.Wilk "Release Profiles of Esculin-loaded Hydrogel Microcapsules Covered with Polyelectrolyte Shells", 31st Conf. of European Colloid and Interface Society ECIS 2017, Madrid 2017
132. P.Warszyński, E.Jarek, Ł.Lamch, K.A.Wilk "Surface Activity of Cleavable Amidequats", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
133. E.Wierus, E.Niedziałkowska, P.Porębski, K.Kurpiewska, T.Borowski "Seek and Hide - a Story of Plant 2-Oxoglutarate Dependent Dioxygenases Expression", 6th Int. School on Biological Crystallization ISBC, Granada 2017

134. M.Wlodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, S.Kereiche, L.Kovacik, P.Warszyński "Incorporation of Quantum Dots into Lipid Bilayers Supported on Polyelectrolyte Cushions", Int. CECAM-Workshop 'Tackling complexity of the nano/bio interface – computational and experimental approaches', Bremen 2017
135. Z.Wojdyła, A.Kluza, P.Porebski, E.Niedziałkowska, T.Borowski "In silico Study of Thebaine 6-O-Demethylase Activity", 6th Int. Conf. of Biophysics Students, Kraków 2017
136. J.Zawała, A.Niecikowska "Automatic Single Bubble Generator with Adsorption Time Control", 7th Bubble and Drops Int. Workshop, Lyon 2017
137. Y.Zhang, J.Lutkenhuas, M.Sammalkorpi, P.Batys "The Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Poly(Allylamine Hydrochloride)-Poly(Acrylic Acid) Complexes", 4th ChEGSA Annual Research Symp., College Station TX 2017
138. M.Zimowska "Synthesis and Functionality of Innovative Porous Clay Hybrid Nanostructures", Polish-Norwegian Research Programme Final Conf., Warszawa 2017
139. M.Zimowska, J.Gurgul, L.Lityńska-Dobrzyńska, R.P.Socha, K.Łątka "Surface Nanostructures as the Effect of Crystalline-amorphous Porous Clay Heterostructures Functionalization", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017
140. M.Zimowska, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka "Kanemit oraz jego zanieczyszczenia - badania XRD i FTIR", 49. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2017

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. T.Borowski "QM/MM Study on the Metal-Dependent C-C Bond Cleavage by Acireductone Dioxygenase", University of Malta, Msida 2017
2. T.Borowski "Metody chemii obliczeniowej", Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ, Kraków 2017
3. B.Jachimska "Self-Assembling Behaviour of Proteins", University of Limerick, Limerick 2017
4. M.Krzan "Bubble Motion under Turbulent Conditions in Surfactant Solutions", Muenster University, Muenster 2017
5. M.Krzan "Bubble Motion under Turbulent Conditions in Surfactant Solutions", Technische Universität Hamburg, Harburg 2017
6. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, L.Szyk-Warszyńska, S.Kudlacik, K.Bialik-Was, A.Drabczyk, B.Tyliszczak, F.Ravera, R.Todorov, P.Warszyński, E.Mileva, L.Ligierri, D.Exerowa "Particle Laden Stabilization of Foams Consisting Biological Active Compounds", Université Paris Sud, Paris 2017
7. A.Kupczak "Modelling Impact of Hygroscopic Heritage Collections on Indoor Microclimate and Energy Consumption", Eindhoven University of Technology, Eindhoven 2017

8. A.Micek-Ilnicka "Studia doktoranckie przy Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN: system stypendialny, wskaźnik sukcesu, akredytacja", 2. Spotkanie Kierowników i Administracji Studiów Doktoranckich PAN, Instytut Biologii Doświadczalnej PAN, Warszawa 2017
9. G.Mordarski "Ogniwa paliwowe", Tauron Dystrybucja Oddział w Tarnowie, Tarnów, 2017
10. M.Mosiąlek "Instability of Noble Metal Electrodes in Solid Oxide Fuel Cells", University in Genoa, 2017
11. M.Oćwieja "Funkcjonalne nano- i mikrocząstki dla zastosowań w biologii, medycynie i analityce", Klaster LifeScience, Kraków 2017
12. A.Pomorska "Fundamentals and Applications of QCM", Akadamiackie Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH, Kraków 2017
13. M.Ruggiero-Mikołajczyk "Cathodic Thin Films for Use in Solid Oxide Fuel Cells", University of Santiago de Compostela, 2017
14. M. Ruggiero-Mikołajczyk "Catalytic Materials for CO₂ and Biomass Conversion – Hydrogenation of CO₂ to Methanol", University of Catania 2017
15. E.Serwicka-Bahranowska "Catalysts Derived from Layered Minerals for Abatement of Volatile Organic Compounds", Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, Kraków 2017
16. E.Serwicka-Bahranowska "Design of Mesoporous Silica Supports Derived from Layered Silicate Minerals", Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, Kraków 2017
17. M.Strojecki "Mikroklimat zabytkowych wnętrz - problemy, zagrożenia, prewencja na przykładzie polskich świątyń", Wydział Architektury Politechniki Krakowskiej, 2017
18. M.Szaleniec "Enzymy – katalizatory życia", Festiwal Nauki, Zespół Szkół w Trzebini, 2017
19. M.Szaleniec "Zastosowanie metody automatycznej sieci neuronowej do analizy wyników badań medycznych", Uniwersytet Medyczny, Łódź 2017
20. P.Warszyński "Functional Multilayer Films and Microencapsulation", Loughborough University, 2017
21. M.Witko "Krzysztof", PAU Sesja in Memoriam to Jerzy Vetulani i Krzysztof Wędzony, Kraków 2017
22. M.Witko "Współpraca jednostki PAN - uczelnie", Konferencja Lokalna PAN, Kraków 2017
23. A.Wojtkiewicz "Stopped Flow Measurements for FAD-Dependent 3-Ketosteroid Dehydrogenase from Sterolibacterium denitrificans", University Groningen 2017

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. P.Basarova (University of Chemistry and Technology, Prague) "Bubble Motion in Aqueous Solutions of Simple Alcohols – Myths and Reality"
2. V.Cortes Corberan (Spanish National Research Council CSIC, Madrid) "Hydrogen Production by Reforming of Ethanol on Non-noble Metal Catalysts"
3. C.Dupont-Gillain (Universite Catholique de Louvain) "Tunable Protein Immobilization at Interfaces Based on Polyelectrolyte-protein Interactions"
4. G.Ionita (National Institute for Research and Development for Cryogenic and Isotopes Technologies ICSI, Ramnicu Valcea) "Hydrophobic Catalysts for Hydrogen Isotopes Separation"
5. M.Jaskuła (Uniwersytet Jagielloński) "Informacja na temat stypendiów Alexandra von Humboldta"
6. M.Kania (Uniwersytet Jagielloński) "Misterium śmierci i odrodzenia w tradycji latynoamerykańskiej: historia i współczesność" [wykład wielkanocny]
7. D.Majda (Uniwersytet Jagielloński) "Termoporozymetria jako metoda badania materiałów mezoporowatych"
8. G.Mlostoń (Uniwersytet Łódzki) "Cebula, czosnek i kwaśne deszcze, czyli o badaniach matrycowych reaktywnych związków siarkoorganicznych"
9. V.Nicolescu (National Institute for Research and Development for Cryogenic and Isotopes Technologies ICSI, Ramnicu Valcea) "Mesoporous Silica – Applications in Life Quality Improvement"
10. A.Niedzielska "Dioscuri – konkurs na utworzenie centrów doskonałości naukowej"
11. K.Noga (AKC Cyfronet) "Efektywne wykorzystanie KDM w obliczeniach naukowych"
12. K.Noga, M.Czuchry (AKC Cyfronet) "PYTHON"
13. W.Piskorz (Uniwersytet Jagielloński) "Mikrokinetyczne modelowanie procesów katalitycznych w kierunku deN₂O na spinelach kobaltowych"
14. P.Rejmak (Instytut Fizyki PAN, Warszawa) "Badania strukturalne bioaktywnych kompleksów Cu(II) metodami obliczeniowymi i adsorpcyjnej spektroskopii rentgenowskiej"
15. T.Salkus (Vilnius University) "Impedance Spectroscopy Study of Lithium- and Sodium-Conducting Solid Electrolytes"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. J.Barbasz "Cyberbezpieczeństwo"
2. M.Biliński (Muzeum Bombki Choinkowej, Nowa Dęba) "Bombka choinkowa- historia i manufaktura we Muzeum Bombki Choinkowej" [wykład bożonarodzeniowy]
3. A.Drzewiecka-Matuszek "Kwantowo-chemiczne badanie reaktywności porfiryń żelaza i manganu w wybranych reakcjach utleniania"
4. A.Knera "Zamówienia publiczne"
5. R.Kozłowski "Etyka w nauce"
6. P.Nowak "Piryt – niezwykle minerał"
7. A.Pomorska "Zastosowanie QCM w badaniach adsorpcji funkcjonalnych koloidów, pochodnych kwasu fosforowego oraz szczotek polimerowych"
8. M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kupczak "Mobilność dedukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacje uczestników z pobytu na szkoleniach na: University in Catania, University in Santiago de Compostela, Technical University in Eindhoven"
9. T.Szumelda "Nośnikowe katalizatory immobilizowane na osnowie PD (PdAu, PdIr, PdRu, PdPt). Właściwości fizykochemiczne i katalityczne w reakcjach związków karbonylowych"
10. M.Tararuch, M.Krzan, T.Borowski "Mobilność dedukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacje uczestników z pobytu na szkoleniach na: Hamburg University of Technology, Philipps-University, Marburg, University of Malta, Msida"

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. J.Barbasz "Oglądamy niewidzialne"
2. W.Łasocha "Kwarc - pospolity, niepospolity minerał"
3. A.Micek-Ilnicka "Niezwykłe formy węgla - od fulerenu do grafenu"
4. K.Kurpiewska "Komunikacja kolorami i fizykochemiczna tajemnica kameleonów"
5. D.Rutkowska-Żbik "Polimery, plastiki i tworzywa (nie zawsze) sztuczne"

UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

PROFESORA

1. T.Borowski

DOKTORA HABILITOWANEGO

1. K.Szczepanowicz "Polielektrolitowe nanoosińniki do zastosowań biomedycznych"

DOKTORA

1. A.Drzewiecka-Matuszek "Kwantowo-chemiczne badanie reaktywności porfiryn żelaza i manganu w wybranych reakcjach utleniania" (promotor D.Rutkowska-Żbik)
2. Ł.Kończak "Mechanizm desorpcji nanocząstek metalicznych z krawędzi nanorurek węglowych i jej optymalizacja przy użyciu modelowania molekularnego" (promotor T.Pańczyk)
3. J.Piotrowska "Catalytic Oxidation of Cyclohexanone to ϵ -Caprolactone with Hydrogen Peroxide over Synthetic and Natural Basic Minerals" (promotor E.Serwicka-Bahranowska)
4. K.Podgórna "Polymer Hydrogels as Carriers of Active Compounds" (promotor P.Warszyński, promotor pomocniczy K.Szczepanowicz)
5. M.Sadowska "Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych" (promotor Z.Adamczyk)
6. A.Stępniewski "Czynniki elektronowe determinujące aktywność centrów metali przejściowych w zeolitach i kompleksach o znaczeniu katalitycznym" (promotor E.Broclawik, promotor pomocniczy M.Radoń)
7. T.Szumelda "Wpływ struktury bimetalicznych cząstek Pd-X (X=Au, Ir) w katalizatorach nośnikowych na selektywność uwodorniania C=O/C=C w nienasyconych związkach karbonylowych" (promotor A.Drelinkiewicz)
8. M.Włodek "Polyelectrolyte-Lipid Films with Embedded Hydrophobic Quantum Dots" (promotor P.Warszyński, promotor pomocniczy M.Kolasińska-Sojka)
9. B.Wolanin "Nanostruktury tlenków tytanu na powierzchni W (001) funkcjonalizowane metalami" (promotor N.Spiridis)
10. P.Wolski "Modelowanie molekularne adsorpcji doksorubicyny i wybranych cząsteczek barwników na powierzchni jednościennych nanorurek węglowych" (promotor T.Pańczyk)

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

1. 49 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 15-17 marca 2017 (B.Sulikowski)
2. European School on Interfacial Engineering: Fundamentals, Applications, and Analytical Methods, ESIE 2017, Kraków 3-6 kwietnia 2017 (P.Warszyński)
3. PANel Wiedzy – spotkanie naukowe Rady Samorządu Doktorantów Polskiej Akademii Nauk, Kraków 19 maja 2017 (W.Snoch)

4. 8th World Congress on Oxidation Catalysis & 12th European Workshop Meeting in Innovation in Selective Oxidation Catalysis, Krakow 3-8 września 2017 (M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj)

IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. 17. Festiwal Nauki i Sztuki "W zgodzie z naturą", Rynek Główny, Kraków 25-27 maja 2017 (N.Spiridis)
2. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 12 czerwca 2017 (M.Nattich-Rak)

WYRÓŻNIENIA I NAGRODY

1. Pierwsza nagroda w piątej edycji konkursu ProPAN 2015 na najbardziej produktorancki instytut PAN w organizowanym przez przez Krajową Reprezentację Doktorantów i Samorząd Doktorantów PAN
2. A.Rugor - nagroda za prezentację posteru, Royal Society of Chemistry Books, 10th Molybdenum and Tungstate Enzyme Conf., Santa Fe 2017
3. M.Szaleniec – nagroda im. Włodzimierza Kołosa III Wydziału PAN
4. K.Tokarczyk - stypendium doktoranckie Prezesa PAN
5. Ł.Wolski - nagroda za najlepsze wystąpienie ustne, Konferencja FGF 'Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne', Lublin 2017

WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

Wypis 1/101/2018

z protokołu 101. posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk – XIV. posiedzenia kadencji 2015-2018 w dniu 8.03.2018, dotyczący sprawozdania z działalności naukowej Instytutu w roku 2017

Ad. 4. Sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu za 2017 rok

Prof. Tomasz Borowski przedstawił sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu. Przedstawił tematykę 18 zadań statutowych pogrupowanych w następujących działach:

- Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju (9 zadań),
- Fizykochemia powierzchni i nanostruktur – eksperyment i teoria (3 zadania),
- Nanostruktury materii miękkiej (5 zadań),
- Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury (1 zadanie).

Prof. Tomasz Borowski poinformował Radę, że działalność statutowa Instytutu została szczegółowo omówiona na seminarium sprawozdawczym Instytutu, które odbyło się 19 stycznia 2018, a następnie przedstawił i omówił:

- a) rodzaje projektów badawczych, realizowanych w ubiegłym roku w Instytucie, wraz ze źródłami ich finansowania: NCN (30), NCBiR (2), MNiSW (2), FNP (2), projekty programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej (1), projekty na podstawie umów dwustronnych (2), COST (2),
- b) funkcjonowanie i współpracę w ramach KNOW, którego realizacja zakończyła się w 2017 roku,
- c) środki finansowe przeznaczone na poszczególne rodzaje działalności,
- d) strukturę zatrudnienia,
- e) dorobek naukowy Instytutu:

– monografie	1
– rozdziały w książkach	3
– artykuły w czasopismach międzynarodowych (JCR, lista A)	108
– artykuły w innych czasopismach (lista B)	4
– inne publikacje	6
– streszczenia w materiałach konferencyjnych	154
– wydawnictwa nakładem Instytutu (materiały konferencyjne – abstrakty)	2

i jego porównanie z latami poprzednimi oraz patenty i zgłoszenia patentowe,
- f) najlepsze publikacje (z nowym osiągnięciem badawczym, artykuł przeglądowy i artykuł popularnonaukowy) opublikowane w:
 - Appl. Catal. B, 211 (2017) 46,
 - J. Allergy Clin Immunol, (2017) 1728,
 - Phys. Chem. Chem. Phys., 19 (2017) 22721,
 - Adv. Colloid Interface Sci., 250 (2017) 95,
 - Wszechświat, 118 (2017) 108,oraz nagrodę specjalną dla prof. Zbigniewa Adamczyka za monografię „Particles at Interfaces. Interaction, Deposition, Structure”, wydaną przez Elsevier-Academic Press, 2017,
- g) udział pracowników w konferencjach naukowych i wykładach,
- h) uzyskane tytuły i stopnie naukowe,
- i) otrzymane nagrody,
- j) zorganizowane konferencje naukowe,
- k) zorganizowane imprezy popularno-naukowe,

- 1) główne osiągnięcia naukowe w roku 2017 (uzyskane w wyniku realizacji badań):
- w ramach projektów/zadań badawczych:
 - „Właściwości magnetyczne układu CoO/Fe(001): exchange-bias w funkcji grubości warstw i temperatury” (zadanie statutowe) oraz „Modyfikacja reaktywności katalizatorów palladowych przez wodorowe brzozy wolframowe” (zadanie statutowe),
 - o znaczeniu ogólnospołecznym lub gospodarczym związane z działalnością naukową:
 - „Kinetyka utworzenia kontaktu trójfazowego i flotacji kwarcu w czystych i mieszanych roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych” (zadanie statutowe) oraz „Synteza suspensji nanocząstek srebra i złota” (projekt badawczy NCN),
 - zastosowania wyników badań naukowych lub prac rozwojowych o znaczeniu społecznym i gospodarczym; działania zwiększające innowacyjność: „Katalityczne utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu nadtlaniem wodoru na naturalnych minerałach zasadowych” (zadanie statutowe) oraz „Ilościowa ocena zagrożeń zabytkowego pergaminu i drewna przez warunki mikroklimatu” (zadanie statutowe),
 - rezultaty współpracy międzynarodowej: „Monitorowania i pomiary rozwoju mikrouszkodzeń obiektów referencyjnych z kolekcji National Trust metodą emisji akustycznej” (współpraca z National Trust, Wielka Brytania).

Dyskusja nad przedstawionym sprawozdaniem, w której udział wzięli: prof. Stanisław Słomkowski prof. Jerzy Lis, prof. Janusz Igras, prof. Małgorzata Witko, prof. Maria Nowakowska, dotyczyła:

- liczby N (liczby pracowników badawczych do parametryzacji jednostki),
- bardzo dobrych wyników działania Instytutu, w szczególności w zakresie uzyskanych patentów, ilości kształconych doktorantów oraz prowadzonych staży i prac magisterskich wykonywanych w Instytucie,
- dużej aktywności Instytutu w kształceniu młodej kadry naukowej,
- zrównoważonego rozwoju Instytutu,
- dwóch nowouruchomionych interdyscyplinarnych programów doktoranckich, które wpływają na integrację krakowskiego środowiska naukowego.

Przewodnicząca Rady, zamykając dyskusję zaproponowała wniosek stwierdzający, że Rada przyjmuje sprawozdanie z działalności Instytutu w roku 2017 i wyraża się z uznaniem o aktywności naukowej i edukacyjnej Instytutu. W jawnym głosowaniu przyjęto jednogłośnie wniosek i sprawozdanie.

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