



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



Krajowy Naukowy  
Ośrodek Wiodący

**SPRAWOZDANIE  
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU  
W ROKU 2015**



**Kraków, luty 2016**

## **SPIS TREŚCI**

|                                                         |     |
|---------------------------------------------------------|-----|
| Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu           | 5   |
| Zadania badawcze realizowane w roku 2015                | 9   |
| Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2015 | 13  |
| Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2015    | 19  |
| Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący                         | 19  |
| Działalność statutowa Instytutu                         | 23  |
| Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"                      | 57  |
| Projekty badawcze NCN "Sonata"                          | 61  |
| Projekty badawcze NCN "Opus"                            | 69  |
| Projekty badawcze NCN "Preludium"                       | 85  |
| Projekty badawcze NCN "Harmonia"                        | 93  |
| Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"                 | 97  |
| Projekty strategiczne NCBiR                             | 103 |
| Projekty badań stosowanych NCBiR                        | 107 |
| Projekty NCBiR "Lider"                                  | 111 |
| Projekty 7. Programu Ramowego UE                        | 125 |
| Projekty Akcji COST UE                                  | 119 |
| Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej         | 125 |
| Projekty Funduszy Strukturalnych UE                     | 131 |
| Inne międzynarodowe projekty badawcze                   | 137 |
| Projekty Programu Erasmus+                              | 141 |
| Dorobek naukowy Instytutu za rok 2015                   | 145 |
| Publikacje naukowe ogłoszone drukiem                    | 145 |
| Udział w konferencjach i zebraniach naukowych           | 189 |
| Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu   | 227 |



# **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 2015 jest opracowanie nowego pola siłowego do symulacji węglowodanów, określenie siły oddziaływania w niemodyfikowanych chemicznie układach

koloidalnych z wykorzystaniem spektroskopii sił oraz opracowanie składu katalizatorów do przeróbki alkoholu furfurylowego w kierunku bio-komponentów do paliw i tworzyw sztucznych.

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 2015 roku studia trzeciego stopnia - studia doktoranckie w ramach trzech struktur:

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

Realizację studiów doktoranckich w ramach projektów strategicznych PO KL zakończono w 2015 roku.

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

## **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 latach 2012-2016 jest koordynatorem akcji COST CM 1101 "Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials" z udziałem 70 organizacji badawczych z 36 krajów.

### **Popularyzacja nauki**

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

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



## **ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2015**

### **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. Aktywność fotokatalityczna minerałów warstwowych podpieranych tlenkami metali przejściowych                                       | 27 |
| 2. Nowe źródła energii; materiały i procesy. Katalizatory na osnowie tlenku wolframu; uwodornianie furfuralu i elektroredukcja tlenu | 28 |
| 3. Nowe perokso- oraz poliookso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania   | 29 |
| 4. Badania nad przeróbką alkoholu furfurylowego w kierunku bio-komponentów do paliw i tworzyw sztucznych                             | 30 |
| 5. Uwodornienie acetolu w obecności katalizatorów metalicznych osadzonych na mezoporowatych krzemionkach                             | 31 |
| 6. Heteropolizwiązki jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do kaprolaktonu tlenem molekularnym                                 | 32 |
| 7. Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych                                                                    | 33 |
| 8. Charakterystyka fizykochemiczna i katalityczna układu heteropolikwas-tlenek w konwersji alkoholu izopropylowego                   | 34 |
| 9. Opis mechanizmu reakcji redukcji tlenu z udziałem wybranych materiałów katodowych dla wysokotemperaturowych ogniw paliwowych      | 35 |

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

- |                                                                                                                                                                                                                                                  |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 10. Mechanizmy reakcji enzymatycznych i biomimetycznych - badania teoretyczne                                                                                                                                                                    | 39 |
| 11. Materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe i modelowanie kwantowo-chemiczne.                                                                                | 41 |
| 12. Właściwości strukturalne, elektronowe i dynamika powierzchni i nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni. Adsorpcja tlenu na żelazie – stary problem, nowe spojrzenie                | 42 |
| 13. Badania wpływu parametrów mikroskopowych i fizykochemicznych na możliwość kontroli właściwości układów o potencjalnym znaczeniu biomedycznym. Mechanizm reakcji mutarotacji glukozy oraz reinterpretacja równowagi anometrycznej w heksozach | 44 |
| 14. Badania teoretyczne aktywności katalitycznej soli heteropolikwasów                                                                                                                                                                           | 45 |

#### **Nanostruktury materii miękkiej**

- |                                                                                                                                                                                                                                  |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 15. Topologia i właściwości elektrokinetycznych monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe. Określenie konformacji albumin na podstawie pomiarów potencjału przepływu oraz osadzania mikrocząstek polimerycznych | 49 |
| 16. Wpływ jonowych i niejonowych substancji powierzchniowo aktywnych na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na hydrofilowych i hydrofobowych powierzchniach stałych                                                       | 50 |
| 17. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe                                                                                                                                                                          | 51 |

## Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

18. Opracowanie modelu osadzania pyłów we wnętrzach budynków zabytkowych. 55  
Wentylacja i ogrzewanie kościołów zabytkowych – niestabilność wilgotnościowa i brudzenie

## KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

### Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"

1. ST4 [2013-2017] Wspomagane komputerowo projektowanie i przewidywanie właściwości 59  
nośników leków opartych na strukturze nanorurek węglowych
2. NZ1 [2015-2020] Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu w biosyntezie alkaloidów 60  
o aktywności farmakologicznej – struktury, mechanizmy reakcji i racjonalne  
przeprojektowywanie enzymów

### Projekty badawcze NCN "Sonata"

1. ST5 [2011-2016] Nowe katalizatory Pd-Pt/nanokompozyt hybrydowy do redukcji tlenu 63  
w polimerowym ogniwie paliwowym
2. ST4 [2012-2015] Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: 64  
modelowanie komputerowe
3. ST5 [2012-2017] Wcelowane dostarczanie leków - synteza i funkcjonalizacja 65  
nanonośników
4. ST4 [2013-2017] Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu 66  
przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium  
denitrificans*
5. ST4 [2013-2017] Mechanizm i kinetyka koalescencji pęcherzyków powietrza na 67  
spokojnych i zaburzanych z kontrolowaną częstotliwością powierzchniach ciecz/gaz
6. ST4 [2015-2017] Nowe biwarstwowe układy białkowe oparte na oddziaływaniach 68  
antygen-przeciwciało – charakterystyka fizykochemiczna in situ

### Projekty badawcze NCN "Opus"

1. ST8 [2011-2015] Opracowanie technologii wytwarzanie stabilnej i łatwo 71  
biodegradowalnej piany ciekłej do zastosowań przemysłowych i biomedycznych
2. ST5 [2012-2015] Wpływ gliceryny jako nietoksycznego i biodegradowalnego 72  
rozpuszczalnika na mechanizm utleniania fenolu
3. ST4 [2012-2015] Właściwości fizykochemiczne i katalityczne heteropolikwasów 73  
modyfikowanych jonami miedzi. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment
4. ST4 [2012-2016] Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant-polielektrolit w procesie 74  
tworzenia nowej generacji nanonośników
5. NZ1 [2012-2016] Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne 75  
i obliczeniowe
6. ST4 [2013-2016] Badania chemii powierzchni katalizatorów hybrydowych jako droga 76  
do wyjaśnienia ich właściwości katalitycznych w wysokociśnieniowej reakcji syntezy  
eteru dimetylowego z mieszaniny H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>
7. ST5 [2013-2016] Nanoklastery zeolitów jako podstawa nowych warstwowych materiałów 77  
porowatych do procesów katalitycznych w fazie ciekłej
8. ST5 [2013-2016] Projektowanie, synteza i charakterystyka fizykochemiczna 78  
katalizatorów rutenowych oraz ich zastosowanie w reakcji uwodornienia prochiralnych  
ketonów
9. ST4 [2013-2016] Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór 79

|                                                                                                                                                                                                                                                                            |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 10. ST4 [2013-2016] Określenie mechanizmów adsorpcji wybranych białek anizotropowych w kontrolowanych warunkach transportu                                                                                                                                                 | 80 |
| 11. ST5 [2013-2016] Struktura i właściwości warstw białkowych: od biomolekuły do funkcjonalnej warstwy (badania eksperymentalne i symulacje)                                                                                                                               | 81 |
| 12. ST5 [2014-2016] Synteza kompozytów zawierających nanocząstki metali (Fe, Mn, Pd) i porowate, domieszkowane azotem materiały węglowe o różnej morfologii ziaren oraz charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych w reakcji redukcji tlenu | 82 |
| 13. ST5 [2014-2017] Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania na osnowie organosmektytów interkalowanych odwróconymi micelami zawierającymi nanostruktury typu wodorotlenków i hydrotalkitów                                                                         | 83 |
| 14. NZ1 [2015-2017] Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu katalizujące atypowe reakcje utleniania – badania nad strukturami oraz mechanizmami enzymatycznymi                                                                                                               | 84 |

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

|                                                                                                                                                                                               |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. ST5 [2013-2016] Wielowarstwowe filmy polimerowe zawierające nanocząstki oraz grafen jako funkcjonalne powłoki i membrany                                                                   | 87 |
| 2. ST5 [2013-2015] Charakterystyka elektrokinetyczna oddziaływań monowarstw HSA rekombinowanego z ligandami jonowymi                                                                          | 88 |
| 3. ST4 [2013-2015] Określenie mechanizmów adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach nośników koloidalnych                                                                                       | 89 |
| 4. ST4 [2014-2016] Sprzężenie elektronowe cząsteczki tlenku azotu (II) z centrami kobaltowymi w różnych otoczeniach koordynacyjnych: rola przepływu gęstości elektronowej w aktywacji liganda | 90 |
| 5. ST4 [2014-2016] Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych                                                                                    | 91 |

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

|                                                                                                                             |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. ST4 [2013-2015] Obrazowanie lokalnej kinetyki reakcji katalitycznych dla układów modelowych w skali mezo- i nanoskopowej | 95 |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

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

|                                                                                                                                                                                   |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1. [2013-2015] Zaawansowane badania teoretyczne nad reakcją mutarotacji D-glukopiranozy                                                                                           | 99  |
| 2. [2013-2015] Magnetyczne systemy dostarczania leków z możliwością sterowanego uwalniania czynnika aktywnego                                                                     | 100 |
| 3. [2014-2016] Teoretyczny opis wpływu zmian ruchliwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe na przebieg kolizji i kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego | 101 |

#### **Projekty strategiczne NCBiR**

|                                                                                                                                                                                                                             |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1. [2012-2015] NUCLEAR Projektowanie katalizatorów do rekombinacji wodoru i tlenu pod kątem kontroli ich aktywności jako czynnika o krytycznym znaczeniu dla bezpieczeństwa pracy rekombinatorów w instalacjach nuklearnych | 105 |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|

#### **Projekty badań stosowanych NCBiR**

|                                                                                               |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1. [2013-2016] HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych (MN) | 109 |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|-----|

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

- |                                                                                                                                               |            |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. [2012-2016] Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej | <b>113</b> |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|

### **ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE**

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

- |                                                                                                                                                                       |            |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. EC 7 <sup>th</sup> FP [2012-2015] NanoEIS Nanotechnology Education for Industry and Society (CSA)                                                                  | <b>117</b> |
| 2. EC 7 <sup>th</sup> FP HYPERCONNECT [2013-2015] Functional Joining of Dissimilar Materials Using Directed Self-assembly of Nanoparticles by Capillary-bridging (CP) | <b>118</b> |

#### **Projekty Akcji COST UE**

- |                                                                                                                                                       |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. EC COST CM1101 [2011-2015] Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials                                                 | <b>121</b> |
| 2. EC COST CM 1305 [2012-2016] ECOSTBio Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry                                              | <b>122</b> |
| 3. EC COST CM1203 [2012-2016] PoCheMoN Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience                                                            | <b>123</b> |
| 4. EC COST MP1106 [2012-2016] SGI Smart and Green Interfaces - from Single Bubbles and Drops to Industrial, Environmental and Biomedical Applications | <b>124</b> |

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

- |                                                                                                                             |            |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. [2013-2016] NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies against Neurodegenerative Diseases (core)          | <b>127</b> |
| 2. [2013-2015] FUNCLAY Synthesis and Functionality of Innovative Porous Clay Hybrid Nanostructures (small grant)            | <b>128</b> |
| 3. [2013-2016] InlinePV In-line Processing of n+/p and p/p+ Junction System for Cheap Photovoltaic Module Production (core) | <b>129</b> |

#### **Projekty Funduszy Strukturalnych UE**

- |                                                                                                                   |            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. PO KL 4.1.1 [2009-2015] ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości       | <b>133</b> |
| 2. PO IG 1.3.1 [2009-2015] BIOTRANSFORMACJE Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym | <b>134</b> |
| 3. PO KL 4.1.1 [2010-2015] ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny                                              | <b>135</b> |

#### **Inne międzynarodowe projekty badawcze**

- |                                                                                                                                      |            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. [2013-2015] Organo-Clays as Intermediates for the Synthesis of Functional Hybrid Materials (projekt współpracy PAN - AN Słowacji) | <b>139</b> |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|

#### **Projekty Programu Erasmus+**

- |                                                                              |            |
|------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1. Program międzynarodowej wymiany naukowców Erasmus+ "Mobilność edukacyjna" | <b>143</b> |
|------------------------------------------------------------------------------|------------|

## **SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2015**

### **W ROKU 2015:**

|                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|---------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| realizowano:                    | 18 statutowych zadań badawczych<br>37 projektów badawczych (granty) MNiSW, NCBiR, NCN, FNP<br>(w tym 6 promotorskich)<br>3 projekty 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej<br>4 projekty UE COST Action<br>3 projekty Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej<br>1 inny projekt międzynarodowy<br>3 projekty Funduszy Strukturalnych UE                                                                                                                               |
| opublikowano:                   | 1 monografię<br>7 rozdziałów w monografiach<br>94 publikacje w czasopismach recenzowanych z listy Journal Citation Reports (lista A) (oraz 8 ogłoszonych elektronicznie)<br>7 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy MNiSW (lista B)<br>1 publikację w czasopiśmie recenzowanym z listy European Reference Index for the Humanities ERIH (lista C)<br>15 publikacji w innych w czasopismach,<br>311 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych |
| wydano nakładem Instytutu:      | 2 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| wyłączono<br>i zaprezentowano:  | 141 referatów i komunikatów (w tym 20 referatów plenarnych<br>i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 243 postery                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| dokonano:                       | 9 zgłoszeń patentowych (1 za granicą)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| we współpracy z zagranicą:      | opublikowano 28 wspólnych prac w czasopismach naukowych<br>ogłoszono 46 komunikatów w materiałach konferencyjnych<br>zrealizowano 138 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| zorganizowano:                  | 8 konferencji i posiedzeń naukowych<br>Dzień Otwarty Instytutu<br>stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| stopień doktora habilitowanego: | uzyskały 2 osoby (1 na AGH)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| stopień doktora:                | uzyskało 19 osób (1 na AGH)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |



## WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2015

### **Opracowanie nowego pola siłowego do symulacji węglowodanów**

(W. Płaziński, A. Lonardi, P. Hünenberger)

[współpraca z Swiss Federal Institute of Technology Zurich (ETHZ)]

Osiągnięciem jest opracowanie nowych narzędzi chemii obliczeniowej oraz zastosowanie ich w analizie konformacyjnej mono-, di-, oligo- i polisacharydów. Stworzono klasyczne pole siłowe typu *united atoms*, z rodziny GROMOS, sparametryzowane pod kątem równowagi pomiędzy konformerami pierścieni piranozowych oraz konformacji wiązań glikozydowych. W ramach walidacji ww. zestawu parametrów zbadano m.in. wpływ geometrii pierścieni piranozowych na pozostałe stopnie swobody konformacyjnej w łańcuchach węglowodanów oraz wykazano wpływ metylacji anomerycznej grupy hydroksylowej na systematyczne zmiany w równowadze typu krzesółko-krzesółko odwrócone. Nowe pole siłowe, o nazwie GROMOS 56A6<sub>CARBO\_R</sub>, jest nieodpłatnie udostępniane w formatach programów GROMOS i GROMACS.

### **Określenie siły oddziaływania w niemodyfikowanych chemicznie układach koloidalnych z wykorzystaniem spektroskopii sił**

(J. Barbasz, K. Sofińska)

Osiągnięciem jest opracowanie i przetestowanie metody prowadzenia innowacyjnych pomiarów spektroskopowych (spektroskopia sił atomowych) oddziaływań cząstek koloidalnych osadzonych na powierzchni podłoża i ostrza AFM bez użycia linkerów. Wykorzystanie wiedzy dotyczącej osadzania cząstek koloidalnych w połączeniu z pomiarami spektroskopii sił atomowych w roztworach ciekłych pozwala na określenie oddziaływań w układach koloidalnych np. białko-białko bez modyfikacji chemicznej obu cząsteczek jaką wprowadzają linkery używane typowo w takich pomiarach.

### **Opracowanie składu katalizatorów do przeróbki alkoholu furfurylowego w kierunku bio-komponentów do paliw i tworzyw sztucznych**

(D. Rutkowska-Żbik, R. Grabowski, T. Machej, M. Śliwa, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, Ł. Mokrzycki, W. Rojek)

Osiągnięciem jest opracowanie składu katalizatorów i warunków prowadzenia reakcji hydrogenolizy alkoholu furfurylowego i furfuralu do wartościowych składników paliw i tworzyw sztucznych, w szczególności 2-metylofuranu (DMF) oraz furanu. Aktywności najlepszych katalizatorów, którymi okazały się preparaty na osnowie chromitów, skorelowano z ich właściwościami fizyko-chemicznymi. Dla reakcji hydrogenolizy furfuralu próbki o zdecydowanym charakterze "zasadowym" okazały się selektywne głównie do furanu, dla katalizatorów "kwaśnych" w produktach reakcji dominuje DMF. Stwierdzono ponadto, że katalizatory, które nie są redukowalne w zakresie temperaturowym zbliżonym do temperatur reakcji katalitycznej (150-400°C), nie wykazują wysokiej wydajności do głównego produktu pożądanego, jakim jest DMF.

## **INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2015:**

W roku 2015 zorganizowano 8 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu, stoiska na Krakowskim Festiwalu Nauki (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

### **Działalność popularyzatorska**

#### **Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 6 listopada 2015**

Motywacją dla zorganizowania w dniu 6 listopada 2015, corocznego, już dziewiątego z kolei Dnia Otwartego Instytutu było przekonanie, że publiczne finansowanie badań naukowych zobowiązuje do upowszechniania wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych.

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

- J.Barbasz "Nauka na ekranie - co naprawdę widzimy"
- E.Jarek "Biomimetyka - przyroda inspirowuje naukowców"
- W.Łasocha "Człowiek a kryształy - czy można odkryć coś, co nie powinno istnieć"
- D.Rutkowska-Żbik, T.Borowski "Fizyka i chemia pod wodą"
- J.Szaleniec, M.Szaleniec "Zrozumieć i stworzyć - jak projektujemy leki"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Mikro- i nano- świat widziany w mikroskopie
- Temperatura, ciśnienie i my
- Owocowe baterie
- Reakcja katalityczna - rozkład nadtlenu wodoru
- Białka w mikroskopie
- W kolorowym świecie barwników
- Obrazy malowane światłem
- Czy białe jest białe?
- Konwertery energii
- Chemia od kuchni
- Łatwopalni
- Spektakularne eksperymenty chemiczne

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

- 47. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków, 16-18 marca 2015
- 15th European Student Colloid Conference, Kraków, 8-11 czerwca 2015
- Seminarium 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i Spektroskopia SERS', Kraków, 2-3 lipca 2015
- 9th International Symposium 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids', Wrocław, 7-23 lipca 2015
- 4th International Symposium on Surface Imaging / Spectroscopy at the Solid / Liquid Interface, Kraków, 2-4 września 2015
- Polish-American Innovation Bridge PAIB/PAMI: How to begin, Kraków 20-21 września 2015

- Workshop 'Suspensions – designing, synthesis, properties, application SUSPENS', Kraków, 25 września 2015
- Warsztat "Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów", Warszawa, 13 listopada 2015

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

- Festiwal Nauki "Oświeć się!", Rynek Główny, Kraków 20-23 maja 2015
- Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 6 listopada 2015



## **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 2015, Instytut podjął szereg przedsięwzięć dla zintensyfikowania wspólnych badań pracowników instytucji członkowskich Konsorcjum. Przyznano, w drodze konkursu, 3 granty wspomagające wspólne projekty pracowników Instytutu z badaczami z instytucji partnerskich obejmujących różną tematykę:

1. "Nowe katalizatory konwersji furfuralu do nasyconych alkoholi, składników biopaliw" (dr Robert Kosydar; współpraca z Wydziałem Chemii UJ)
2. "Opracowanie metodyki badania oddziaływania białek modyfikowanych związkami biologicznie aktywnymi z ich receptorami" (dr hab. Barbara Jachimska; współpraca z Wydziałem Chemii UJ)
3. "Nowe estry laktozy" (dr Maciej Guzik; współpraca z Wydziałem Chemii UJ)

Przyznano 6 rocznych stypendiów doktoranckich "Smoluchowski Doctoral Scholarships" 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 Josep Grau-Bove, University College London, Wielka Brytania
2. prof. Jarosław Majewski, Los Alamos Neutron Scattering Center, USA
3. dr Emiliy Zholkovskyy, Institute of Bio-Colloid Chemistry National Academy of Sciences of Ukraine, Kijów, Ukraina.

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



## **DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU**



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



## 1. Aktywność fotokatalityczna minerałów warstwowych podpieraných tlenkami metali przejściowych

*(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, prof. Piotr Warszyński, dr hab. Paweł Nowak prof IkiFP, dr Alicja Michalik-Zym, mgr Bogna D. Napruszewska, dr Ewa Bielańska, dr Roman Dula, mgr Melania Rogowska)*

Celem badań była synteza, charakterystyka fizykochemiczna i porównanie właściwości fotokatalitycznych dwóch typów układów kompozytowych  $\text{TiO}_2$ /montmorillonit, różniących się sposobem wprowadzenia  $\text{TiO}_2$  do struktury minerału.

W syntezie kompozytów  $\text{TiO}_2$ -montmorillonit zastosowano konwencjonalną metodę podpierania oraz nową procedurę z wykorzystaniem metody odwróconej mikroemulsji. Otrzymane materiały poddano szczegółowej analizie fizykochemicznej, stosując metody XRD, XRF, SEM, spektroskopię Ramana oraz adsorpcję/desorpcję  $\text{N}_2$ . Otrzymane kompozyty testowano w reakcjach fotokatalitycznej degradacji dwóch modelowych substancji organicznych: rodaminu B oraz oranżu metylowego. Skuteczność tych układów porównano z komercyjnym produktem  $\text{TiO}_2$  P25.

Metoda podpierania minerału doprowadziła do wytworzenia stosunkowo dobrze uporządkowanych materiałów, w których podpórki tytanowe łączą trwale sąsiednie pakiety minerału, natomiast w wyniku zastosowania metody odwróconej mikroemulsji otrzymano nieuporządkowane układy o częściowo zdelaminowanej strukturze typu "domku z kart" z rozproszonymi w obrębie struktury nanocząstkami  $\text{TiO}_2$ . W obu układach otrzymano nanocząstki  $\text{TiO}_2$  o strukturze anatazu. Przeprowadzone eksperymenty fotokatalitycznego rozkładu barwnika kationowego (rodaminu B) oraz barwnika anionowego (oranżu metylowego), wykazały, że dla obu typów kompozytów osiągnięto pełną dekoloryzację barwnych roztworów, przy czym wyższą aktywność wykazał materiał otrzymany metoda podpierania. Oba kompozyty charakteryzowały się mniejszą aktywnością niż referencyjny  $\text{TiO}_2$  P25, ale związanie nanocząstek  $\text{TiO}_2$  w strukturze minerału warstwowego pozwalało na łatwiejsze odzyskiwanie fotokatalizatora ze środowiska wodnego, ze względu na szybszą i skuteczniejszą sedimentację.

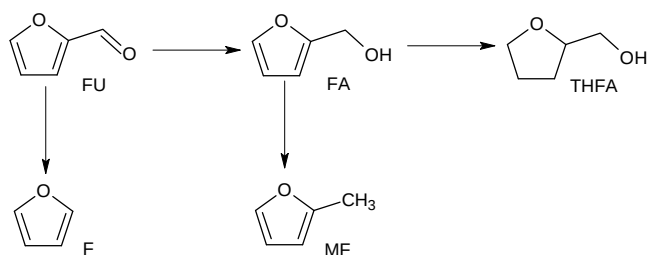
Uzyskane wyniki stanowią punkt wyjścia do dalszych badań nad projektowaniem kompozytów minerałów warstwowych i tlenków metali przejściowych o właściwościach fotokatalitycznych.

## 2. Procesy katalityczne z udziałem bio-surowców

### Uwodornianie furfuralu i elektroredukcja tlenu

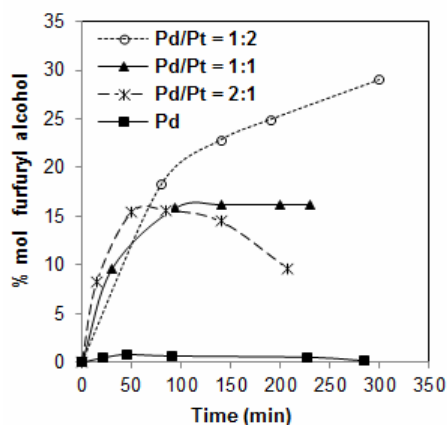
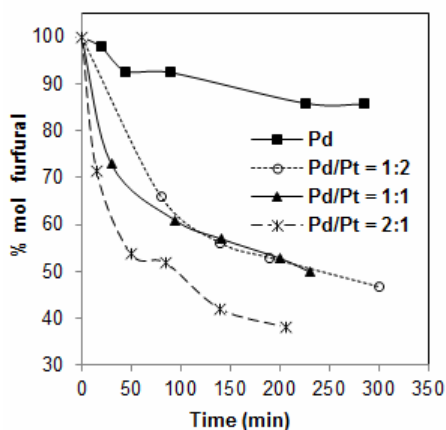
(prof. Alicja Drelinkiewicz, dr Erwin Lalik, dr Robert Kosydar, dr Leszek Matachowski, dr Aleksandra Pacuła, dr Monika Góral-Kurbiel, mgr Michał Kołodziej, mgr Tomasz Szumelda)

**Celem badań** jest określenie roli nośnika na podstawie tlenku molibdenu w reakcji uwodorniania bio-surowca, furfuralu, i elektroredukcji tlenu. W reakcji uwodorniania furfuralu dominującym procesem jest tworzenie FA i uwodornienie jego pierścienia z utworzeniem THFA. Ponadto, zachodzi zwykle dekarbonylacja FU z utworzeniem furanu i CO, produktów powodujących dezaktywację katalizatorów



**Realizowane prace** obejmowały uwodornianie FU (60°C, 6 atm H<sub>2</sub>, toluen) w obecności dwu serii katalizatorów bimetalicznych Pd-Pt, 2 % wt Pd+Pt, stosunek molowy Pd/Pt = 2:1; 1:1; 1:2. Serię I stanowiły katalizatory monometaliczne Pd/P-MoO<sub>3</sub> i bimetaliczne Pd-Pt/P-MoO<sub>3</sub> które uzyskano przez prażenie w kontakcie z powietrzem (20 h, 700°C) soli Pd lub Pd-Pt heteropolikwasu H<sub>3</sub>PMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub> i następnie redukowano H<sub>2</sub> 250°C, 3h. Serię II stanowiły katalizatory Pd/SiO<sub>2</sub> i Pd-Pt/SiO<sub>2</sub> syntezowane metodą odwróconej mikroemulsji (water-in-oil). Katalizatory charakteryzowano metodami BET, XRD, XPS, SEM (EDS).

**Uzyskane wyniki.** Metodą XRD potwierdzono obecność cząstek bimetalicznych Pd-Pt dla obu serii I i II. Wielkość cząstek metalu w katalizatorach serii Pd-Pt/P-MoO<sub>3</sub> była 20-30 nm, w katalizatorach Pd-Pt/SiO<sub>2</sub>, 8-10 nm. W reakcji uwodorniania FU katalizatory serii I charakteryzujące się niską powierzchnią właściwą (2-3 m<sup>2</sup>/g) wykazały znikomą aktywność, 3-4 % konwersji FU. Katalizatory Pd-Pt/SiO<sub>2</sub> były znacznie bardziej aktywne. Wysoka aktywność początkowa Pd/SiO<sub>2</sub> spadała szybko w wyniku zatrucia katalizatora przez produkty dekarbonylacji. Katalizatory Pd-Pt/SiO<sub>2</sub> ulegały znacznie mniejszej dezaktywacji, wykazywały znacznie wyższą selektywność tworzenia FA, gdyż tworzenie THFA było zahamowane.



Badania katodowej elektroredukcji tlenu, zachodzącej w ogniwie paliwowym prowadzono dla Pd/P-MoO<sub>3</sub> i bimetalicznych Pd-Pt/P-MoO<sub>3</sub>, które mieszano z węglem przewodzącym Vulcan XC72. Wszystkie katalizatory były aktywne w elektroredukcji tlenu. Aktywność Pd-Pt była wyższa a potencjał redukcji tlenu przesunięty w kierunku dodatnim w stosunku do monometalicznego Pd. Stosunek Pd:Pt nie wpływał na elektroaktywność układów.

### 3. 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, dr Katarzyna Luberda-Durnaś, mgr Barbara Bożek, dr Marcin Oszajca, Adrianna Borowiec)

Celem badań było uzyskanie nowych połączeń typu peroksokompleksów 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.

W ramach badań prowadzonych w roku 2015:

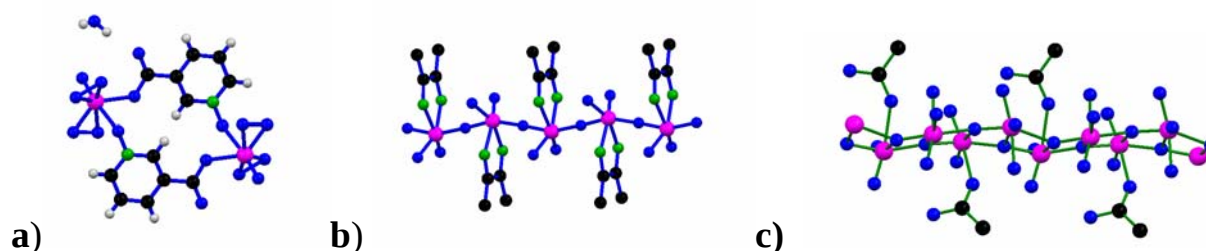
- Prowadzono prace nad otrzymaniem nowych związków z grupy peroksomolibdenianów z kwasami nikotynowym oraz izonikotynowym i nieorganicznymi kationami. W wyniku badań uzyskano nowy perokso- związek z kwasem nikotynowym, nie uzyskano nowych połączeń z kwasem izonikotynowym w postaci preparatów monofazowych.
- Badano nowe połączenia molibdenu powstające w reakcjach z nadmiarem amin alifatycznych: 1,2-diaminopropanu, 1,3-diaminopentanu oraz dietyloaminy.
- Badano nowe połączenia molibdenu powstające w reakcjach w roztworach wodnych, w obecności wybranych amin alifatycznych w obecności nadmiaru kwasu octowego.

Opis najważniejszych osiągnięć:

- Otrzymano i zbadano nowy oksodiperoksomolibdenian sodu  $\text{Na}_2[\text{MoO}(\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  zawierający N-tlenek kwasu nikotynowego wbudowany w cykliczny anion (rys.1a). Parametry sieciowe uzyskanego związku to:  $a=8.0647(2)$ ,  $b=11.9155(2)$ ,  $c=11.6799(3)\text{\AA}$ ,  $109.585(3)^\circ$ ,  $V=1057.44\text{\AA}^3$ , SG  $P2_1/n$ .
- Zbadano nowy hybrydowy tlenek molibdenu o wzorze  $\text{MoO}_3(\text{N}_2\text{C}_3\text{H}_{10})$ . W związku tym występują polimeryczne łańcuchy  $-\text{Mo}-\text{O}-\text{Mo}-\text{O}-$ , każdy atom Mo(VI) dodatkowo łączy się z dwoma terminalnymi atomami tlenu oraz dwoma atomami azotu pochodzącymi z molekuły 1,2-diaminopropanu (rys. 1b), Parametry sieciowe:  $a=8.72458$   $b=11.04544$   $c=7.37513\text{\AA}$ ,  $V=710.72\text{\AA}^3$ , SG  $\text{Abm}2$ .
- Uzyskano nowy związek o wzorze  $\text{NH}_4[\text{Mo}_2\text{O}_6(\text{H}_2\text{O})(\text{CH}_3\text{COO})]$ , w którym występują nieskończone podwójne łańcuchy molibdenowo-tlenowe. Połowa atomów molibdenu koordynuje aniony octanowe (rys. 1c). Podstawowe dane krystalochemiczne:  $a=9.1636(3)$   $b=14.2706(4)$ ,  $c=7.40978(18)\text{\AA}$ ,  $V=968.977$ , SG  $\text{Pnc}2$ . Podobne połączenie uzyskano z użyciem kwasu nikotynowego.

Wykorzystanie uzyskanych wyników.

Planowane jest wykorzystanie wybranych monofazowych preparatów w testach katalitycznych, w tym w reakcjach katalitycznego utleniania związków organicznych, między innymi węglowodorów takich jak cyklooktan i limonen przy użyciu powietrza oraz gazowego  $\text{O}_2$ . Hybrydowy tlenek Mo z 1,2-diaminopropanem będzie testowany w reakcjach epoksydacji.



Rysunek 1. Nowe perokso- i polioksomolibdeniany uzyskane w ramach badań. Kolory: magenta, zielony, czarny i niebieski oznaczają molibden, azot, węgiel i tlen.

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

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

Celem zadania badawczego była optymalizacja składu katalizatora i warunków prowadzenia reakcji hydrogenolizy alkoholu furfurylowego i furfuralu do 2-metylofuranu (DMF) oraz skorelowanie aktywności najlepszych katalizatorów z ich właściwościami fizyko-chemicznymi.

Badane katalizatory zsyntetyzowano metodami: cytrynianową (chromity Ni, Co, Fe i Cu), "Adkinsa" (chromit Cu), oraz poprzez impregnację wybranych nośników (katalizatory Fe/SiO<sub>2</sub>, Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Cu/CuCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>). Przeprowadzono podstawową charakterystykę fizykochemiczną badanych katalizatorów. Użyto metody: XRD do określenia składu fazowego, BET do wyznaczenia powierzchni właściwych, H<sub>2</sub>-TPR do określenia redukowalności, XPS w celu określenia składu oraz stopnia utlenienia metalu w fazie aktywnej. Pomiar właściwości kwasowo-zasadowych metodą - sondą rozkładu izopropanolu (impulsowe nastrzyki 0.5 µL izopropanolu w reaktorze przepływowym ze stałym złożem katalizatora, T<sub>reakcji</sub>=200°C, detekcja TCD). Otrzymane próbki poddano testom katalitycznym w procesie hydrogenolizy alkoholu i aldehydu furfurylowego, w reaktorze przepływowym pod ciśnieniem atmosferycznym, w zakresie temperatur 150-400°C. Mierzono selektywności do produktów hydrogenolizy furfuralu oraz furfuralu – pożądanych (2-metylofuranu i furanu) oraz produktów ubocznych (metanu, etanu i butanu).

W badaniach właściwości kwasowo-zasadowych metodą rozkładu izopropanolu stwierdzono obecność dwóch produktów reakcji rozkładu izopropanolu: propenu powstającego na centrach kwasowych i acetonu tworzącego się na centrach odwodorniających (zasadowych), których stosunek ilościowy zależy od rodzaju katalizatora. Dla preparatów: NiCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, CuCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, Fe/SiO<sub>2</sub>, CoCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> i MnCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> stwierdzono obecność acetonu jako produktu dominującego (najwyższa zasadowość dla CuCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>). Dla próbek Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> przeważa propen; dla chromitu żelazowego jest to jedyny produkt reakcji testowej. Otrzymane wyniki kwasowości skorelowano z wynikami testów katalitycznych. Dla reakcji hydrogenolizy furfuralu próbki o zdecydowanym charakterze „zasadowym” okazały się selektywne głównie do furanu (S<sub>furanu</sub>=100% vs największa ilość acetonu dla CuCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>); dla katalizatorów "kwaśnych" w produktach reakcji dominuje DMF. Podobną zależność zaobserwowano dla reakcji hydrogenolizy furfuralu, za wyjątkiem próbek FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> i Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, dla których prawdopodobnie inne czynniki niż charakter kwasowo-zasadowy decydują o właściwościach katalitycznych (prawdopodobnie stopień utlenienia Fe, jak mogą wskazywać wyniki XPS).

Prowadzone badania mają na celu opracowanie katalizatora, który wykazywać się będzie wysoką selektywnością do 2-metylofuranu, będącego atrakcyjnym dodatkiem do benzyny. Optymalizacja składu katalizatora umożliwiającego uzyskiwanie z dużą wydajnością 2-metylofuranu oraz określenie parametrów fizykochemicznych, które są kluczowe dla jego właściwości katalitycznych, stanowić może istotny wkład w prowadzone na całym świecie badania zmierzające do efektywnego pozyskiwania tego bio-komponentu benzyny z biomasy.

## 5. Uwodornienie acetolu w obecności katalizatorów metalicznych osadzonych na mezoporowatych krzemionkach

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

Celem pracy była synteza, charakterystyka oraz wykorzystanie heterogenicznych katalizatorów rutenowych osadzonych na mezoporowatej krzemionce typu SBA-15 w reakcji uwodornienia acetolu do 1,2-propanodiolu. Reakcja ta stanowi ważny z technologicznego punktu widzenia proces, gdyż powstający w reakcji diol jest wykorzystywany m.in. jako rozpuszczalnik, środek zapobiegający oblodzeniu, dozwolony dodatek do żywności, kosmetyków lub wyrobów farmaceutycznych. Ponadto, reakcja ta odgrywa ważną rolę w procesie hydrogenolizy glicerolu. Niestety prowadzone na skalę przemysłową procesy jak również procedury laboratoryjne wymagają stosowania wysokiego ciśnienia i temperatury, długich czasów reakcji bądź katalizatorów homogenicznych. Oznacza to wysokie zużycie energii oraz stwarza problemy związane z oddzielaniem katalizatorów od mieszaniny reakcyjnej.

W ramach badań przygotowano serię katalizatorów rutenowych o różnej zawartości fazy aktywnej tj. 0.2 wt.% Ru/SBA-15, 0.5 wt.% Ru/SBA-15, 1 wt.% Ru/SBA-15 oraz 2 wt.% Ru/SBA-15. Katalizatory rutenowe otrzymano przez osadzenie rutenu na mezoporowatej krzemionce metodą impregnacji na mokro. Nowe materiały zostały scharakteryzowane za pomocą XRD, XPS, SEM, HRTEM oraz wyznaczono ich własności teksturalne. Badaną reakcję prowadzono w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury (tj. 1 bar  $H_2$  oraz temperaturze pokojowej); jako rozpuszczalnika użyto wody. Aktywność katalityczną 2 wt.% Ru/SBA-15 porównano z 2 wt.% Ru/SiO<sub>2</sub>.

Badania pokazały, że otrzymane katalizatory są aktywne w heterogenicznym uwodornieniu acetolu w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury, a aktywność katalityczna zależy od stężenia fazy aktywnej. Jest ona tym wyższa im wyższe stężenie rutenu, ale sama zmiana aktywności nie jest wprost proporcjonalna do stężenia fazy aktywnej; ta zależność jest bardziej skomplikowana i wynika z różnic w rozmiarach i rozkładzie nanocząstek rutenu osadzonych na SBA-15 i SiO<sub>2</sub>. Dodatkową zaletą stosowanych przez nas katalizatorów jest łatwość odseparowania z mieszaniny reakcyjnej, co stwarza możliwość ich wykorzystania w kolejnych cyklach katalitycznych.

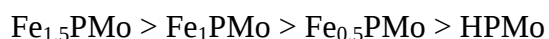
Otrzymane wyniki są punktem wyjściowym do dalszych prac mających na celu wykorzystanie tych aktywnych związków w reakcjach uwodornienia grup C=O, C=C oraz C≡C. Opracowanie odzyskiwalnych katalizatorów heterogenicznych wykazujących wysoką aktywność katalityczną w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury stanowi atrakcyjny kierunek badań.

## 6. Heteropolizwiązki jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do $\epsilon$ -kaprolaktonu tlenem molekularnym

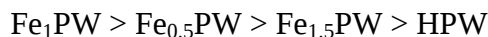
(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Katarzyna Pamin, dr Jan Poltowicz,  
dr Joanna Kryściak-Czerwenka, mgr Bogda D. Napruszewska)

Reakcja Baeyera-Villigera jest szeroko stosowana w chemii organicznej do utleniania cyklicznych ketonów do odpowiednich laktonów. Utlenianie cykloheksanonu prowadzi do otrzymania  $\epsilon$ -kaprolaktonu, który jest substratem do syntezy biodegradowalnego polimeru. Celem badań była synteza soli żelazowych kwasów fosforowolframowego i fosfomolibdenowego oraz określenie ich właściwości fizyko-chemicznych i katalitycznych w reakcji utleniania cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kaprolaktonu za pomocą tlenu cząsteczkowego.

Otrzymane związki były badane różnymi metodami spektroskopowymi takimi jak FTIR, UV-Vis, oraz analizą termiczną DSC i cykliczną woltametrią. Wszystkie otrzymane heteropolizwiązki były aktywnymi katalizatorami badanej reakcji. W przypadku soli żelazowych kwasu fosfomolibdenowego wszystkie sole wykazywały wyższą aktywność niż wyjściowy heteropolikwas, a aktywność soli i konwersja substratu wzrastała wraz ze wzrostem zawartości żelaza w strukturze katalizatora. Otrzymano następujący szereg aktywności dla soli żelazowych kwasu fosfomolibdenowego:



W przypadku soli żelazowych kwasu fosforowolframowego, podobnie jak dla soli żelazowych kwasu fosfomolibdenowego, wszystkie sole wykazywały wyższą aktywność niż wyjściowy heteropolikwas. Ponadto, wszystkie sole żelaza kwasu fosforowolframowego były bardziej aktywne niż odpowiednie sole Fe kwasu fosfomolibdenowego. Aktywność katalityczna serii soli żelazowych kwasu fosforowolframowego zmieniała się w następujący sposób:



Podsumowując, badania wykazały, że niezależnie od natury metalu strukturotwórczego (addenda), wbudowanie w strukturę heteropolizwiązku jonów żelaza, jako kationów kompensujących, ma korzystny wpływ na właściwości katalityczne w reakcji utleniania cykloheksanonu. Najbardziej aktywny spośród wszystkich zsyntezowanych katalizatorów okazał się katalizator  $\text{Fe}_1\text{PW}$ .

Uzyskane wyniki stanowią podstawę do dalszych badań nad optymalizacją katalizatora utleniania cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kaprolaktonu tlenem molekularnym.

## 7. Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych

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

Celem badań było określenie aktywności i selektywności wybranych katalizatorów metalicznych w reakcji uwodornienia benzenu do cykloheksenu. Uwodornienie benzenu jest ważnym procesem przemysłowym służącym do otrzymywania cykloheksenu, który w dalszym etapie jest uwodniany do cykloheksanolu. Powstający cykloheksanol jest ważnym półproduktem do otrzymywania tworzyw poliamidowych takich jak Nylon-6 i Nylon-66. Uwodornienie benzenu w fazie ciekłej na typowych katalizatorach metalicznych (np. niklowych) prowadzi do powstania cykloheksanu. Powodem tego jest wysoka aktywność tego typu katalizatorów, która nie pozwala na zatrzymanie reakcji na etapie cykloheksenu. Trudność procesu polega na takim dobraniu warunków reakcji i katalizatorów, które pozwolą na zatrzymanie uwodornienia benzenu na cykloheksenie i uniemożliwią dalsze jego uwodornienie do cykloheksanu.

W pierwszym etapie badano katalizatory metaliczne, takie jak: katalizator rutenowy (czerń rutenowa), katalizator niklowy, katalizator rodowy i katalizator rutenowo-niklowy. Najbardziej aktywny był katalizator rutenowy i dlatego został wybrany do dalszych badań. W drugim etapie naszych badań określono aktywność katalityczną różnych układów katalitycznych zawierających ruten w reakcji uwodornienia benzenu do cykloheksenu. Większość katalizatorów stanowiły układy zawierające fazę rutenową osadzoną na różnych nośnikach, w tym: Ru na hydrotalkicie cynkowo-glinowym, Ru na węglu aktywnym, Ru na krzemionce, Ru na tlenku cyrkonu. Badano także metaloporfirynę RuTPP(CO)(MeOH) jako katalizator w tej reakcji.

Spośród badanych katalizatorów zawierających ruten najbardziej aktywna okazała się czerń rutenowa. Jest ona jednocześnie najbardziej aktywna spośród wszystkich przebadanych katalizatorów metalicznych.

Uzyskane wyniki stanowią punkt wyjścia do dalszych badań nad zastosowaniem katalizatorów metalicznych do selektywnego uwodornienia benzenu, ze szczególnym uwzględnieniem roli stopnia dyspersji fazy metalicznej.

## 8. Charakterystyka fizykochemiczna i katalityczna układu heteropolikwas-tlenek w konwersji alkoholu izopropylowego

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

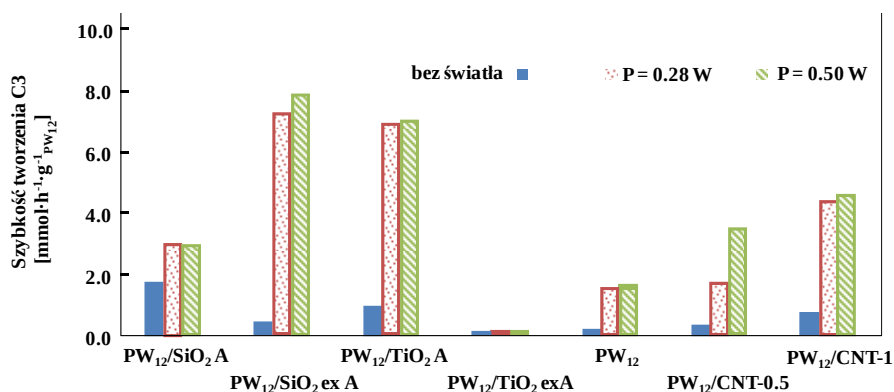
Konwersja alkoholu izopropylowego z użyciem katalizatorów o charakterze kwasowym prowadzi do otrzymania propylenu (C3) i eteru diizopropylowego (DIPE). Reakcja ta jest używana do określania kwasowości stałych katalizatorów. Selektywność do wspomnianych produktów zależy od właściwości kwasowo-zasadowych katalizatora. Celem badań było w pierwszym etapie określenie właściwości fizykochemicznych katalizatorów dwuskładnikowych: heteropolikwas-tlenek. Następnie zmierzenie ich katalitycznej i fotokatalitycznej aktywności w zależności od składu katalizatorów (rodzaju użytego tlenku) jak i od metody ich otrzymywania.

Zsyntetyzowano nowe katalizatory zawierające w swoim składzie heteropolikwas  $H_3PW_{12}O_{40}$  (oznaczany  $PW_{12}$ ) na nośnikach tlenkowych. Jako nośniki użyto komercyjne tlenki:  $SiO_2$  (Mallinckrodt),  $TiO_2$  (Evonik P25) oraz te same tlenki otrzymane w laboratorium z odpowiednich prekursorów, z krzemianu etylu  $(C_2H_5O)_4Si$  i z izopropanolanu tytanu  $Ti[OCH(CH_3)_2]_4$ . Dodatkowo, do testów porównawczych, zsyntetyzowano katalizatory, w których nośnikiem heteropolikwasu były nanorurki węglowe (CNT). Syntezę dwuskładnikowych katalizatorów przeprowadzono metodami: hydrotermalną (skróót „A”) i solwotermiczną (skrót „exA”). Testy katalityczne konwersji 2-propanolu w układzie ciało stałe-gaz przeprowadzono w reaktorze przepływowym przy ciśnieniu atmosferycznym w zakresie temperatur 60-120°C. Produkty analizowano przy użyciu chromatografu gazowego. Do przeprowadzania testów fotokatalitycznych użyto lampy UV o mocy 0.28 W i 0.5 W. Ponadto wykonano monitorowanie przebiegu reakcji przy użyciu spektroskopii FTIR. Produktami konwersji alkoholu izopropylowego na badanych katalizatorach były propylen i diizopropylowy eter.

Przeprowadzone badania pozwoliły porównać katalityczne i fotokatalityczne właściwości nowo otrzymanych dwuskładnikowych materiałów zawierających heteropolikwas na podłożu tlenkowym

w konwersji alkoholu izopropylowego.

Naświetlanie światłem UV spowodowało wzrost aktywności praktycznie wszystkich materiałów w porównaniu z układem bez udziału światła. Najwyższą szybkość tworzenia propylenu uzyskano dla układu w którym materiały



" $PW_{12}/TiO_2$  A" i " $PW_{12}/SiO_2$  exA" (rysunek) były naświetlane światłem UV. Zaobserwowano 7-krotny wzrost szybkości tworzenia się C3 w testach z UV. Wyznaczono pozorną energię aktywacji konwersji izopropanolu. Dla wszystkich katalizatorów energia aktywacji reakcji fotokatalitycznej była niższa od energii aktywacji reakcji katalitycznej.

Ponieważ tak duży wzrost aktywności materiałów pod wpływem ich naświetlania jest efektem bardzo obiecującym planujemy w najbliższej przyszłości, w oparciu o wyniki testów katalitycznych i fotokatalitycznych konwersji alkoholu izopropylowego, wyjaśnić rolę heteropolikwasu w tych materiałach

## 9. Opis mechanizmu reakcji redukcji tlenu z udziałem wybranych materiałów katodowych dla wysokotemperaturowych ogniów paliwowych

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

Reakcja redukcji tlenu na tlenkowych materiałach katodowych jest reakcją czteroelektronową i zachodzi poprzez wiele etapów pośrednich. Celem zadania było wskazanie, który z etapów reakcji redukcji tlenu jest etapem limitującym i zaproponowanie, na tej podstawie, metody poprawy aktywności katalitycznej badanych materiałów.

W badaniach posłużono się materiałami, których syntezę opisano w sprawozdaniu z 2014 roku. Były to materiały kompozytowe, składające się z kobaltanu samaru strontu  $\text{Sm}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{CoO}_{3-\delta}$  (SSC) oraz żelazianu lantanu strontu  $\text{La}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{FeO}_{3-\delta}$  (LSF), wykazujące wysoką odporność na szoki temperaturowe, co jest niezwykle istotne z punktu widzenia możliwości ich zastosowania w ogniach paliwowych. Jako elektrolit zastosowano tlenek ceru samaru  $\text{Ce}_{0,8}\text{Sm}_{0,2}\text{O}_{1,9}$  (SDC), który wykazuje wysokie przewodnictwo jonowe w zakresie najniższych temperatur możliwych do zastosowania w wysokotemperaturowych ogniach paliwowych. Mechanizm reakcji redukcji tlenu badano metodami woltametrii cyklicznej i elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej. Prowadzono również dalsze prace nad optymalizacją procedury otrzymywania badanych materiałów katodowych.

Jak stwierdzono na podstawie badań kompozytów SSC-LSF spiekanych w temperaturach: 900, 950, 1000, 1050 i 1100°C najniższy opór polaryzacyjny (a więc najwyższą aktywność katalityczną) wykazywał materiał spiekany w temperaturze 1000°C. W porównaniu z materiałami spiekanymi w niższych temperaturach materiał ten jest dostatecznie dobrze spieczony, wykazując jeszcze stosunkowo wysoką powierzchnię właściwą, a także stosunkowo wysoki udział mezoporów, umożliwiających transport tlenu. Ten właśnie materiał został wybrany do badania mechanizmu procesu redukcji tlenu.

W widmie impedancyjnym elektrody z kompozytu SSC-LSF, na której zachodzi reakcja redukcji tlenu wyróżnić można nawet 5 charakterystycznych kształtów (półkoli), odpowiadających różnym etapom procesu redukcji tlenu. Trzy procesy, których impedancja uwidocznia się w zakresie wysokich częstotliwości wykazują całkowity brak zależności od ciśnienia parcjalnego tlenu, co jest charakterystyczne dla procesów związanych z przepływem prądu przez elektrolit, oraz bardzo niskie wartości skorelowanej z nimi pojemności: od  $1,6 \times 10^{-8}$  do  $4,3 \times 10^{-6}$  F  $\text{cm}^{-2}$  w temperaturze 700°C w czystym tlenie. Są to wartości charakterystyczne dla pojemności związanej z granicami międzyziarnowymi. Rezystancja związana z półkolem rejestrowanym w zakresie średnich częstotliwości zależy od stężenia tlenu zgodnie ze wzorem  $\log(R)=a-m \log(P_{\text{O}_2})$ , przy czym współczynnik  $m$  przyjmuje wartości z zakresu 0,05-0,15. Wartość współczynnika  $m$  zbliżona do 0,125 może wskazywać, że obserwowane półkole związane jest z reakcją  $\text{O}_{\text{ads}} + 2\text{e} \leftrightarrow \text{O}^2$ , w której proces przeniesienia drugiego elektronu jest wolniejszy niż pierwszego, zachodzącej na granicy faz elektroda|elektrolit. Podobne wartości rezystancji wykazywał proces rejestrowany przy najniższych częstotliwościach. Współczynnik  $m$  przyjmuje dla tego procesu wartości zbliżone do 0,5 co świadczy o tym że jest to proces powierzchniowej adsorpcji na powierzchni materiału katody powiązane z reakcją dysocjacji  $\text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{O}_{\text{ads}}$ . W zależności od warunków prowadzenia reakcji (temperatura, ciśnienie tlenu) jeden z dwóch ostatnich procesów jest etapem limitującym szybkość reakcji.

Opisany materiał katodowy może zostać zastosowany w wysokotemperaturowych ogniach paliwowych. Poprawę aktywności katalitycznej można uzyskać osadzając na jego powierzchni nanocząstki katalizujące proces adsorpcji tlenu.



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



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

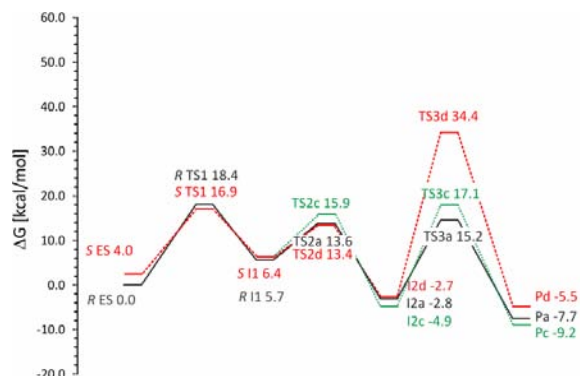
(dr hab. Maciej Szaleniec, dr hab. Tomasz Borowski prof. IKiFP, dr Maciej Guzik

Celem zadania było uzyskanie wglądu w mechanizm reakcji syntazy benzoilobursztynianowej (BSS) w oparciu o strukturę krystaliczną apoenzymu.

Badania były prowadzone we współpracy z grupą prof. Heidera z Uniwersytetu w Marburgu, gdzie wykonywane były prace doświadczalne. Modelowanie teoretyczne miało odpowiedzieć na następujące pytania: 1) jaka jest geometria wiązania substratów (toluenu i kwasu fumarowego) w centrum aktywnym enzymu, 2) jaki jest najbardziej prawdopodobny mechanizm reakcji katalitycznej i czy jest on zgodny z wynikami kinetycznych testów izotopowych oraz znakowaniem izotopowym oraz 3) jakie czynniki odpowiadają za enancjoselektywność reakcji (enzym katalizuje reakcje syntezy wyłącznie do (*R*)-benzoilobursztynianu).

W celu wyznaczenia struktury kompleksu enzym-substrat przeprowadzono w pierwszej kolejności dokowanie produktu reakcji (*R*)-benzoilobursztynianu do centrum aktywnego i zidentyfikowano najkorzystniejszy rozkład protonacji reszt karboksylowych. Otrzymany kompleks poddano następnie symulacji metoda dynamiki molekularnej (pole siłowe CHARMM) w celu relaksacji struktury krystalicznej oraz wzajemnego dopasowania centrum aktywnego i ligandu. Wybraną geometrię o najniższej energii schłodzono do 0K a następnie zastąpiono produkt substratami w konfiguracji pro(*R*) i ponownie zoptymalizowano geometrię kompleksu. Otrzymano również na drodze obrotu fumaranu kompleks ES o konfiguracji pro(*S*). Minimalizacja geometrii obu kompleksów pozwoliła na porównanie energii wiązania substratów w konfiguracji pro(*S*) i pro(*R*). Wykazano, że enzym charakteryzuje się niewielką termodynamiczną preferencją do wiązania fumaranu w orientacji pro(*R*) (7 kcal/mol).

Rysunek 1. 3 różne warianty reakcji katalizowanej przez BSS:  
linia czarna – ścieżka pro(*R*) atak na dystalny atom węgla fumaranu, linia czerwona i zielona ścieżka pro(*S*), linia czerwona atak na proksymalny atom fumaranu, linia zielona atak na dystalny atom fumaranu.



Na podstawie uzyskanej struktury kompleksu ES skonstruowano model klasterowy, który posłużył do przebadania 5 różnych wariantów ścieżki reakcyjnej metodą obliczeń DFT ((B3LYP+D2 6-31G(d,p)/6-311+G(2d,2p) + poprawki IEFPCM i wibracyjne obliczone w bazie 6-31G(d,p)). Wyniki obliczeń potwierdziły preferencje enzymu do ataku rodnika benzyłowego na dystalny (względem Cys493) atom węgla fumaranu. Alternatywna ścieżka reakcji związana z atakiem na atom proksymalny wiąże się z bardzo wysoką barierą wygaszania rodnika (wysoki TS3d). Analiza profilu energii swobodnej wykazała, że limitującym procesem jest najprawdopodobniej TS1 (rodnikowa aktywacja wiązania C-H toluenu) ale proces wygaszania rodnika jest również bliski najwyższej bariery. Obliczone efekty izotopowe dla obu procesów względem ES są nierozróżnialne (6.9 i 6.7), natomiast efekt izotopowy obliczony dla TS3 względem I2 jest bardzo bliski wartości obserwowanej doświadczalnie (4.0). Ponadto obliczenia DFT potwierdziły, że powstanie kompleksu ES w konfiguracji pro(*S*) jest termodynamicznie mniej prawdopodobne. Wykazano również, że etap powstawania wiązania C-C (TS2) wpływa na brak powstawania produktu w konfiguracji (*S*), ze względu na fakt, że bariera ta jest niższa dla

konfiguracji *pro(S)* dla ataku na proksymalny atom węgla (TS2d), co związane jest z bardzo wysoką barierą TS3d.

Uzyskane wyniki mogą posłużyć jako punkt startowy w poszukiwaniach biokatalizatorów stereoselektywnego sprzęgania toluenu i fumaranu.

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

(prof. Ewa Broclawik, prof. Bogdan Sulikowski)

Badania kwantowo-chemiczne poszerzały zapoczątkowane w poprzednim okresie sprawozdawczym badania nad modyfikacją właściwości donorowych oraz aktywności kationowych centrów w zeolitach przez ko-adsorpcję donorowych ligandów. Celem badań eksperymentalnych było uściślenie opisu zależności pomiędzy modyfikacją zeolitów typu fozajytu (w zakresie zawartości ilości glinu sieciowego i pozasieciowego) a ich aktywnością i selektywnością w procesie transformacji  $\alpha$ -pinenu w fazie ciekłej.

Określono metodami teoretycznymi zależność i charakter przepływu ładunku pomiędzy centrum Co(II) (modyfikowanym ligandami donorowymi  $\text{NH}_3$ ) a substratem NO. W ramach badań eksperymentalnych otrzymano w oparciu o zeolit typu Y serię preparatów modyfikowanych na drodze wymiany jonowej i kalcynacji w szerokim zakresie temperatur oraz obecności lub nieobecności pary wodnej. Próbkę scharakteryzowano metodami: XRD, adsorpcji azotu, spektroskopii w podczerwieni i spektroskopii NMR w ciele stałym dla jąder  $^{29}\text{Si}$  i  $^{27}\text{Al}$ . Wykonano wstępne eksperymenty mające na celu wygenerowanie w zeolitach dodatkowego systemu mezoporów. Badania fizykochemiczne skorelowano z aktywnością katalityczną w procesie izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu. Przeprowadzono dealuminiowanie naturalnego mezolitu (zeolitu o strukturze NAT) i skorelowano parametry geometryczne sieci glinokrzemianowej z widmami  $^{29}\text{Si}$  i  $^{27}\text{Al}$  NMR o wysokiej rozdzielczości. Przypisano jakościowo i ilościowo wszystkie sygnały krzemowe i glinowe do odpowiednich ugrupowań.

Wyniki badań teoretycznych pozwoliły na pełne wyjaśnienie oraz nową interpretację widm IR dla kobaltowych form zeolitu typu MFI, fozajytu i mordenitu. Zaproponowano nową metodę ilościowej oceny udziału struktur rezonansowych (odpowiadających formom  $\text{NO}^+$ ,  $\text{NO}^-$  lub  $\text{NO}^0$ ) w kompleksach metal przejściowy – NO; metoda ta wyjaśniła w pełni zależność aktywacji cząsteczki NO od właściwości donorowych centrum kobaltowego. Ilościowa dekonwolucja widm NMR pozwoliła na ścisłe określenie statusu krzemu i glinu w próbkach po dealuminiowaniu. Udokumentowano przebieg transformacji sieci glinokrzemianowej zachodzącej podczas dealuminiowania w różnych warunkach. Przy użyciu dwuwymiarowych widm NMR określono status glinu w preparatach wyjściowych typu FAU i NAT oraz po ich dealuminiowaniu. Udokumentowano przebieg procesu dealuminiowania FAU w różnych warunkach. Przeprowadzono badania dealuminiowania naturalnego klinoptylolitu (HEU).

Nowa metoda ilościowej oceny udziału struktur rezonansowych w kompleksach metal przejściowy – NO powinna wnieść nową informację do szerokiej dyskusji w nauce światowej nad charakterem wiązania z tlenkiem azotu (w języku form ładunkowych  $\text{NO}^+$ ,  $\text{NO}^-$  lub  $\text{NO}^0$ ). Wykazano, po raz pierwszy w literaturze światowej, obecność glinu w trzech nierównocennych magnetycznie i krystalograficznie pozycjach sieciowych w naturalnym mezolicie, stosując metodę  $^{27}\text{Al}$  3MQ MAS NMR. Otrzymano ponadto aktywne i selektywne katalizatory oparte na klinoptylolicie naturalnym.

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

### **Adsorpcja tlenu na żelazie – stary problem, nowe spojrzenie**

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

Celem badań jest określenie zależności pomiędzy strukturą atomową i elektronową epitaksjalnych nanostruktur, a ich właściwościami funkcjonalizowanymi pod kątem zastosowań katalitycznych i magnetycznych. Stosowana technika epitaksji z wiązek molekularnych umożliwia otrzymywanie struktur metalicznych i tlenkowych w szerokim zakresie składów, a także stabilizowanie faz metastabilnych, które nie występują w naturze. Szczególny nacisk położony był na heterostruktury typu metal-tlenek zarówno w układach dwu- jak i wielowarstwowych. W układach takich możliwe jest modelowanie właściwości katalitycznych odpowiadających heterogenicznym katalizatorom metalicznym na nośnikach tlenkowych. Z drugiej strony układy cienkowarstwowe metal ferromagnetyczny - tlenek antyferromagnetyczny stanowią podstawowe „cegiełki” urządzeń spintronicznych, takich jak np. zawory spinowe czy pamięci RAM. Badania dla monokrystalicznych próbek modelowych są porównywane z analogicznymi układami polikrystalicznymi.

Najważniejsze realizowane badania dotyczyły cienkowarstwowych struktur tlenkowych FeO i MnO. Stosowana była kompleksowa metodyka charakteryzacji strukturalnej i magnetycznej, w której jako podstawowe metody badawcze wykorzystywane były mikroskopie elektronów niskoenergetycznych i fotoelektronów – LEEM i PEEM, skaningowa mikroskopia tunelowa - STM, spektroskopia Mössbauera elektronów konwersji – CEMS oraz spektroskopia fotoelektronów – XPS. Kontynuowano też prace dotyczące rozwoju metod mikrospektroskopowych z użyciem promieniowania synchrotronowego.

Skorelowano właściwości strukturalne i magnetyczne ultracienkich warstw FeO(111) na Pt(111). Badania prowadzone były zarówno z użyciem metod laboratoryjnych jak i promieniowania synchrotronowego – jądrowego nieelastycznego rozpraszania. Stwierdzono, że właściwości strukturalne warstw odbiegają od właściwości litego odpowiednika tlenku żelaza o stechiometrii FeO, czyli wustytu. Pokazano, że fononowe gęstości stanów dla monowarstwowych grubości wykazują liniową zależność od energii dla niskich energii, co jest charakterystyczne dla układów dwu-wymiarowych. Ze wzrostem grubości pokazano stopniowe przejście od zachowania dwu-wymiarowego do zachowania trój-wymiarowego. Dla grubości rzędu kilku monowarstw stwierdzono długozasięgowe ferromagnetyczne uporządkowanie, które nie występuje w materiale litym. Zaobserwowane właściwości warstw świadczą o stabilizacji nietypowej fazy FeO, która nie występuje w warunkach naturalnych. Obecność takiej fazy uzasadniono obliczeniami z pierwszych zasad.

Ze względu na występowanie manganu na wielu stopniach utlenienia tlenki manganu są szeroko stosowane w katalizie, również w fazach mieszanych z innymi tlenkami metali 3d. Przebadano możliwości otrzymywania epitaksjalnych warstw tlenku manganu poprzez utlenianie. Otrzymano epitaksjalne tlenki manganu o stechiometrii MnO, Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub> oraz mieszane tlenki manganu i żelaza w strukturze spinelu Fe<sub>3-x</sub>Mn<sub>x</sub>O<sub>4</sub>, a także przebadano ich właściwości strukturalne i magnetyczne.

Badano układy katalityczne oparte na związkach żelaza (II) a dedykowane do utleniania związków organicznych. Porównano katalizatory FeO/SiO<sub>2</sub> oraz FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, dla których w celu określenia stanów elektronowych pierwiastków na powierzchni układów poddanych cykлом testów katalitycznych użyto spektroskopii fotoelektronów (XPS/ESCA). Stwierdzono, że w przypadku

$\text{FeCr}_2\text{O}_4$ , proces utleniania prowadzi do częściowej (ok. 25%) hydroksylacji powierzchni chromitów oraz utworzenia wiązań koordynacyjnych między chromem (III) a tzw. węglem organicznym. Jony  $\text{Fe}^{2+}$  wykazują stopień hydroksylacji właściwy dla badanej powierzchni (ok. 28%) i dużo mniejszy niż w układzie testowanym w takiej samej reakcji gdzie żelazo (II) występowało w formie tlenku osadzonego na  $\text{SiO}_2$  (ok. 70%). Stwierdzono stabilizujący wpływ chromitu na otoczenie tlenkowe jonów żelaza (II).

Nowe perspektywy badawcze w opisanej wyżej tematyce otwiera osiągnięcie docelowych parametrów spektromikroskopowej linii w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris.

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

*(dr hab. Tomasz Pańczyk prof. IKiFP, dr hab. Wojciech Płaziński, 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 głównie na układach, które mogą, w określonych warunkach, funkcjonować jako nośniki leków, przy czym koncentrowano się na znaczeniu takich parametrów jak: struktura nanorurek węglowych, rozmiar biokompatybilnych nanocząstek metali, wpływ pH środowiska na efekty adsorpcji/desorpcji wybranych cząsteczek na powierzchni/wnętrze nanorurek węglowych, znaczenie katalitycznej roli wody w procesach przemian strukturalnych zachodzących w cząsteczkach heksapiranoz, stabilności konformacyjnej biomolekuł, adsorpcji i struktury warstw białkowych na powierzchniach biokompatybilnych oraz efektów pęcznienia dendrymerów typu PAMAM.

Powyższe cele zrealizowano poprzez: zbadanie wpływu rozmiaru nanorurek węglowych i funkcjonalizowanych nanocząstek metalicznych na energię oddziaływań dyspersyjnych pomiędzy tymi komponentami oraz zdolności wiązania cząsteczek dokсорubicyny na powierzchni i we wnętrzu nanorurek węglowych o różnych parametrach chiralności. Ponadto, stosując metodę transition path sampling, wyznaczono oraz poddano analizie ścieżki reakcji dla reakcji otwierania pierścienia glukozy (anomery alfa i beta) przebiegające w środowisku wodnym. Analizowano również struktury monowarstw dendrymerów PAMAM zaadsorbowanych na powierzchni krzemionki. Zastosowano wieloparametrowy powierzchniowy rezonans plazmonów (SPR) oraz mikrowagę kwarcową z dyssypacją energii (QCM-D).

Najistotniejsze wnioski wynikające z przeprowadzonych badań to: wykazanie, że kluczowym parametrem determinującym potencjalną użyteczność układów hybrydowych typu nanorurka węglowa – nanocząstka metaliczna jako nośnik leków jest rozmiar. Nanocząstki o rozmiarach rzędu kilkunastu Å mogą ulegać odwracalnej adsorpcji na powierzchni nanorurek, natomiast nanocząstki o rozmiarach większych niż ok. 40 Å będą adsorbować się praktycznie nieodwracalnie. Adsorpcja dokсорubicyny na powierzchni nanorurek węglowych jak też i w ich wnętrzu jest stosunkowo słaba. Istnieje, zatem konieczność stosowania dodatkowych modyfikatorów, których zadaniem będzie zwiększenie stabilności układu. Wykazano, że otwieranie pierścienia piranozowego może przebiegać z udziałem zarówno jednej jak i dwóch cząsteczek wody, przy czym pierwszy z tych mechanizmów jest bardziej prawdopodobny. Reakcja jest zainicjowana przez deprotonację anomerycznej grupy hydroksylowej; kolejny etap, tj. transfer protonu na atom tlenu w pierścieniu jest niezbędny do ostatecznego rozerwania pierścienia. Na podstawie pomiarów MP-SPR można określić mechanizm adsorpcji dendrymerów: odwracalność procesu adsorpcji, orientację cząsteczek na powierzchni adsorpcyjnej, pokrycie powierzchniowe dla szerokiego zakresu stężenia PAMAM oraz stopień hydratacji tworzonych warstw. Wykazano, że struktura powstałych filmów PAMAM na powierzchni adsorpcyjnej silnie zależy od warunków osadzania.

Układy typu nanorurka węglowa – nanocząstka metaliczna, jak też dendrymery typu PAMAM wykazują użyteczne właściwości jako układy dostarczania leków o możliwym do zaimplementowania czynniku wyzwalającym uwalnianie leku, np. zmiana pH. Podobne cechy można wskazać w przypadku adsorpcji dokсорubicyny we wnętrzu nanorurki węglowej. Praktyczne wytworzenie takich układów wymaga jednak dodatkowych badań. Reakcja otwierania pierścienia piranozowego jest powszechna w przyrodzie oraz istotna dla układów biologicznych. Wyjaśnienie jej mechanizmu może być znaczące w zrozumieniu działania enzymów degradujących węglowodany oraz istoty równowagi anomerycznej.

## 14. Badania teoretyczne aktywności katalitycznej soli heteropolikwasów

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

Prezentowane obliczenia teoretyczne, przeprowadzone zostały w celu określenia struktury geometrycznej i elektronowej różnych soli heteropolikwasów, związków stosowanych zarówno w reakcjach selektywnego utleniania jak i w reakcjach, gdzie potrzebne są katalizatory o właściwościach kwasowych. Różnorodność soli wynika zarówno z możliwości zastosowanych różnorodnych kationów kompensujących (np. metali alkalicznych, metali przejściowych, pierwiastków grup głównych, kationów organicznych) jak i z różnorodnej stechiometrii, która jest wynikiem całkowitej lub częściowej wymiany protonów w heteropolikwasach o szkieletce wolframowym czy molibdenowym ( $\text{Me}_x\text{H}_{3-x}\text{PW}(\text{Mo})$ ). Celem obliczeń było określenie wpływu struktury geometrycznej heteropolianionu, jego składu chemicznego oraz rodzaju kationu kompensującego na właściwości kwasowe i utleniające soli.

Obliczenia przeprowadzono przy użyciu zarówno modelu klasterowego jak i modelu periodycznego. W podejściu klasterowym do modelowania użyto dwóch modeli: i) solwatowanych kationów kompensujących (do wykazania różnic w aktywności różnorodnych kationów np.  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ ), ii) hydratyzowanych kationów metali połączonych z wolframowym albo molibdenowym anionem Keggina lub Dawsona (do wykazania wpływu geometrii heteropolianionu, różnorodnych atomów addenda czy jonu centralnego na właściwości soli). Model periodyczny posłużył do wyznaczenia parametrów struktury geometrycznej soli.

Wyniki przeprowadzonych obliczeń klasterowych pokazały, że właściwości kwasowe soli (których miarą jest energia tworzenia protonu w układach zhydratyzowanych) zależą zarówno od rodzaju kationu kompensującego, geometrii heteropolianionu jak i charakteru chemicznego atomów addenda. W niewielkim stopniu są funkcją charakteru chemicznego jonu centralnego. Sole pierwiastków grup głównych wykazują silniejsze właściwości kwasowe niż sole metali przejściowych. Sole heteropolikwasów opartych na anionie Keggina mają właściwości kwasowe silniejsze niż sole heteropolikwasów o strukturze anionów Dawsona.

Właściwości utleniające modelowano poprzez opis adsorpcji i aktywacji donorów tlenu (cząsteczek  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ) na solwatowanych (skoordynowanych z  $\text{H}_2\text{O}$  i  $\text{CH}_3\text{CN}$ ) kationach kompensujących ( $\text{Cs}^{1+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ ). Wyniki obliczeń pokazały, że adsorpcja i aktywacja (osłabienie i wydłużenie wiązań O-O) badanych cząsteczek zachodzi na metalach przejściowych.

Ponieważ dla większości soli brakuje danych krystalograficznych, przeprowadzono obliczenia przy użyciu modelu periodycznego w celu wyznaczenia rozmiaru komórki elementarnej wybranych soli kwasu fosforo-wolframowego. Optymalny rozmiar komórki elementarnej określono poprzez badanie zależności energii od objętości komórki oraz dopasowanie jej do równania Murnaghana. W pierwszym przybliżeniu założono układ regularny dla wszystkich badanych układów. Uzyskano optymalne wielkości komórek elementarnych dla czystego heteropolikwasu oraz następujących soli:  $\text{Li}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Na}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{K}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Rb}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Cs}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{AlPW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{GaPW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{InPW}_{12}\text{O}_{40}$ , oraz mieszanych soli  $\text{Cs}_2\text{Al}_{0.3}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$  i  $\text{Cs}_2\text{In}_{0.3}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ . W porównaniu do danych doświadczalnych dla kwasu oraz soli potasowej, obliczone rozmiary komórek są zawyżone co najprawdopodobniej wynika z niedostatecznego uwzględnienia oddziaływań typu van der Waalsa w obliczeniach.

Obliczenia wymagają kontynuacji. W dalszej perspektywie zbadane zostaną układy, o których wiadomo, że nie krystalizują w układzie regularnym, np. sole magnezowe. Zbadany też zostanie wpływ uwzględnienia oddziaływań van der Waalsa na optymalne rozmiary komórek. Uzyskane wyniki posłużą do skonstruowania modeli soli heteropolikwasów w celu zbadania ich właściwości katalitycznych i skorelowania danych teoretycznych z eksperymentalnymi.



## **Nanostruktury materii miękkiej**

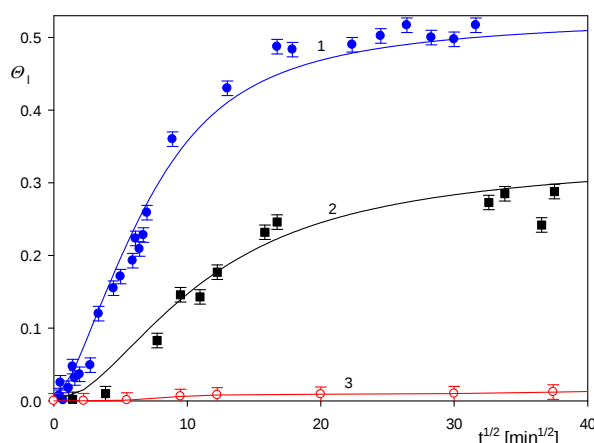


## 15. Topologia i właściwości elektrokinetyczne monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe.

### Określenie konformacji albumin na podstawie pomiarów potencjału przepływu oraz osadzania mikrocząstek polimerycznych

(prof. Zbigniew Adamczyk, dr hab. Jakub Barbasz, dr Piotr Batys, dr Anna Bratek-Skicki, dr Marta Kujda, dr Aneta Michna, dr Maria Morga, dr Małgorzata Nattich-Rak, dr Monika Wasilewska, dr hab. Paweł Weroński prof IKiFP)

Technika wzmocnienia koloidalnego została wykorzystana do charakterystyki monowarstw albuminy osocza krwi (HSA) tworzonych na powierzchni miki w warunkach transportu dyfuzyjnego przy pH 3.5 dla szerokiego zakresu sił jonowych. Stężenie powierzchniowe albuminy  $N_a$  wyznaczano ilościowo przy użyciu obrazowania techniką AFM pojedynczych cząsteczek. Jako układ koloidalny zastosowano suspensję mikrocząstek polimerycznych o wielkości 820 nm charakteryzujących się ujemnym ładunkiem powierzchniowym. Pokrycie lateksu wyznaczano przy pomocy mikroskopii optycznej oraz mikroskopii sił atomowych. Właściwości elektrokinetyczne monowarstw oraz ich stabilność były określane przy użyciu metody potencjału przepływu. Wykazano, że ujemny potencjał zeta miki zmienia znak dla stężenia powierzchniowego albumin  $N_a$  powyżej  $2800 \mu\text{m}^{-2}$ , co interpretowano jako efekt przeładowania powierzchni. Strukturę monowarstw albumin oraz orientację cząsteczek określano przez pomiar kinetyki osadzania mikrocząstek polimerycznych, wyznaczanej dla różnych stężeń powierzchniowych. Jak można zaobserwować na Rys. 1 efektywność osadzania mikrocząstek wzrasta raptownie ze wzrostem pokrycia  $N_a$ , co umożliwia ilościową charakterystykę monowarstw albuminy oraz precyzyjne określenie jej stężenia objętościowego. Warto zaznaczyć, że wyniki doświadczalne są dobrze opisywane wynikami teoretycznymi obliczonymi z modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji (RSSA).



Rysunek. 1. Kinetyka osadzania mikrocząstek polimerycznych na monowarstwach albuminy (HSA) o różnym stężeniu powierzchniowym  $N_a$  wyznaczona przy metodą mikroskopii optycznej dla siły jonowej 0,15 M, pH 3,5, stężenia mikrocząstek 0,5% ( $5000 \text{ mg L}^{-1}$ ). Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane dla  $N_a = 5 \times 10^3 [\mu\text{m}^{-2}]$  ( $\bullet$ ),  $N_a = 3 \times 10^2 [\mu\text{m}^{-2}]$  ( $\blacksquare$ ),  $N_a = 60 [\mu\text{m}^{-2}]$  ( $\circ$ ). Linie 1-3 przedstawiają wyniki teoretyczne obliczone przy użyciu modelu RSSA.

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

## **16. Wpływ jonowych i niejonowych substancji powierzchniowo aktywnych na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na hydrofilowych i hydrofobowych powierzchniach stałych"**

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

Celem badań było określenie wpływu preferencyjnej adsorpcji różnych substancji powierzchniowo aktywnych na granicy międzyfazowej roztwór/gaz (powierzchnia pęcherzyka) na kinetykę utworzenia kontaktu trójfazowego w trakcie kolizji pęcherzyków z hydrofilowymi i hydrofobowymi powierzchniami ciała stałego. Kolizje pęcherzyków z powierzchniami ciał stałych (ziarnami w procesie flotacji) są dynamicznymi procesami zachodzącymi w czasach milisekundowych. W trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego może zostać utworzony kontakt trójfazowy, jeżeli nastąpi w czasie kolizji przerwanie filmu ciekłego oddzielającego powierzchnię pęcherzyka od powierzchni stałej. Adsorpcja substancji powierzchniowo aktywnej na powierzchni pęcherzyka wpływa na jego prędkość (obniża znacznie prędkości graniczne) oraz może wpływać na kinetykę wyciekania i stabilność filmów zwilżających powstających w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego.

W pomiarach określano wpływ różnych substancji powierzchniowo aktywnych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) w trakcie kolizji pęcherzyków z hydrofobowymi (Teflon) i hydrofilowymi (mika) powierzchniami ciał stałych. Dla wyznaczenia wpływu typu grupy polarnej pomiary wykonano w roztworach niejonowych (n-heksanol oraz n-oktanol), kationowych (n-oktyl-, n-dodecyl- oraz n-heksadecyl-trójmetylamoniowy bromek) oraz anionowych (n-heksadecylosiarczan sodu) substancji powierzchniowo aktywnych (SAS). Czasy powstawania kontaktu trójfazowego ( $t_{TPC}$ ) oraz czasy wyciekania cienkich filmów ciekłych, powstających w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego, wyznaczono poprzez analizę filmów zarejestrowanych przy pomocy szybkiej kamery ( $> 1000$  klatek/sekunda). Wyniki wykonanych pomiarów pokazały, że wpływ badanych SAS na kinetykę powstawania TPC może być całkowicie różny w zależności od hydrofobowych i hydrofilowych właściwości powierzchni ciał stałych. Na hydrofobowej powierzchni Teflonu zawsze następowało przerwanie filmu ciekłego i powstawał TPC, a wartości  $t_{TPC}$  były wyraźnie dłuższe przy wyższych stężeniach roztworów, zarówno w przypadku niejonowych jak i kationowych oraz anionowych SAS. Te wyniki pokazują, że kontakt trójfazowy powstawał w wyniku przerywania filmów pianowych powstających lokalnie pomiędzy uderzającym makro-pęcherzykiem i nano-/mikro-pęcherzykami obecnymi na hydrofobowej powierzchni Teflonu. W przypadku hydrofilowej powierzchni miki filmy zwilżające były stabilne i nigdy nie zaobserwowano powstawania TPC w wodzie destylowanej oraz w roztworach niejonowych i anionowych substancji powierzchniowo aktywnych. Jednakże w roztworach kationowych SAS kontakt trójfazowy powstawał, a czasy powstawania TPC były krótsze przy wyższych stężeniach tych roztworów. Wyniki te pokazują, że w przypadku hydrofilowej powierzchni miki o destabilizacji filmu zwilżającego i możliwości powstania TPC decydują oddziaływania elektrostatyczne. Kontakt trójfazowy powstawał na ujemnie naładowanej powierzchni miki tylko w roztworach kationowych SAS, których preferencyjna adsorpcja na powierzchni pęcherzyków powodowała zmianę ładunku elektrycznego ich powierzchni z ujemnego na dodatni.

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

## 17. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

*(prof. Piotr Warszyński z zespołem)*

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

Celem zadania realizowanego w roku 2015 było określenie wpływu różnych jonów wielowartościowych na właściwości wielowarstw polielektrolitowych zawierających alginian (ALG) jako polianion. Filmy otrzymywano metodą sekwencyjnej adsorpcji warstwa po warstwie z wbudowaniem hydrożelu alginianowego, który otrzymano przez sieciowanie ALG różnymi kationami (Ca, Ba, Gd, Al). Tworzenie wielowarstwowego filmu było monitorowane przy pomocy różnych metod fizykochemicznych: mikrowagi kwarcowej (QCM-D), elipsometrii, spektroskopii FTIR ATR oraz technikami elektrochemicznymi woltamperometrii cyklicznej CV i elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej EIS. Otrzymane wyniki wskazują na to, że wielowarstwy sieciowane miały większą masę powierzchniową niż ich nieusieciowane odpowiedniki. Filmy były silnie uwodnione (od 50 do 85% masowych), przy czym filmy usieciowane charakteryzowały się średnio o 10% większą zawartością wody niż nieusieciowane. Stabilność filmów oceniono po kontakcie z roztworem EDTA. Badanie to wykazało, że filmy ulegały częściowej desorpcji w obecności tego czynnika chelatującego. Transport przez membranę zbadano przy pomocy różnych sond elektrochemicznych, różniących się wielkością i ładunkiem. Do opisu przepuszczalności wielowarstw PLArg/ALG użyto dwa modele (jednorodnej i porowatej membrany) i stwierdzono, że model jednorodnej membrany jest bardziej odpowiedni do tego celu. Przepuszczalności wielowarstw uzyskane z dopasowania elektrycznego układu zastępczego do wyników EIS opartego na przybliżeniu jednorodnej membrany były podobne to tych otrzymanych z metody CV, co dodatkowo potwierdziło słuszność użytego modelu. Obliczone współczynniki podziału między roztwór a membranę były większe niż jeden, co wskazuje na gromadzenie się sondy w membranie. Testy przeżywalności komórkowej wykazały, że bez względu na rodzaj sieciujących jonów, filmy nie hamują proliferacji komórek (testy MTT) ani nie powodują zmian morfologii komórek (testy wizualne z użyciem linii THP-1). Wielowarstwy okazały się obiecującym materiałem na pokrycia zwiększające przyczepność komórek (testy z linią komórkową HEK).

Wyniki prowadzonych prac mogą zostać wykorzystane do wytwarzania biokompatybilnych powłok o kontrolowanej przepuszczalności oraz mikrokapsulek do zastosowania w teranostyce jako nośnik hydrofilowych lub hydrofobowych substancji terapeutycznych i kontrast w obrazowaniu medycznym.



## **Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**



## 18. Opracowanie modelu osiadania pyłów we wnętrzach budynków zabytkowych

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

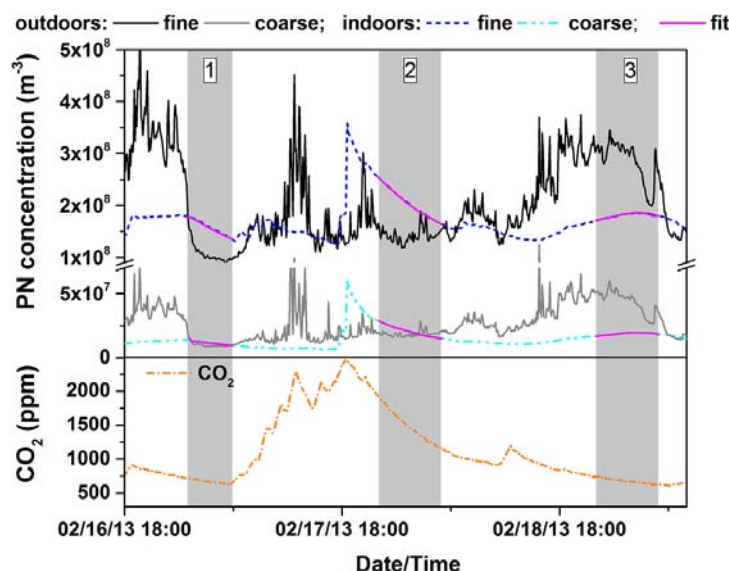
Celem badań jest opracowanie ogólnego modelu przenoszenia i osiadania cząstek pyłu zawieszonego we wnętrzach budowli zabytkowych, oraz poprawa na podstawie wyników modelowania metodyki ograniczającej brudzenie zabytkowych powierzchni, wyposażenia i zbiorów przy różnych rodzajach użytkowania budynków.

Modelowanie składa się z pomiaru stężenia cząstek o różnych rozmiarach w budynku będącym przedmiotem diagnozy oraz wyodrębnienia zaniku stężenia cząstek w trakcie penetracji i w wyniku osiadania przez rozwiązanie równania zachowania masy odnoszącego się do stężenia cząstek na zewnątrz i we wnętrzu (odpowiednio  $C_{out}$  i  $C_{in}$ ) przy użyciu procedury ‘posuwania się do przodu’ krokiem czasowym  $\Delta t$ , odpowiadającym okresom dokonywania pomiaru stężeń cząstek:

$$C_{in}(t_2) = C_{in}(t_1) + P \cdot C_{out}(t_1) \cdot AER(t_1) \cdot \Delta t - C_{in}(t_1) \cdot [AER(t_1) + k] \cdot \Delta t$$

gdzie  $AER$  jest współczynnikiem wymiany powietrza,  $P$  współczynnikiem penetracji, a  $k$  współczynnikiem osiadania.  $AER$  określa się z dopasowania funkcji eksponentialnej do krzywej zaniku różnicy między stężeniami  $CO_2$  zmierzonymi wewnątrz i na zewnątrz, po opuszczeniu przez ludzi budynku. Analizę prowadzi się dla okresów z zaniedbywalną emisją ze źródeł wewnętrznych.

Opracowaną metodę zastosowano do analizy wieloletnich pomiarów stężenia cząstek w zabytkowych kościołach. Znaczna zmienność stężenia cząstek wewnątrz i na zewnątrz pomogła w rozdzieleniu wpływu penetracji i osiadania na zanik stężenia. Na przykład, w trakcie nabożeństw generowano regularnie wysokie stężenia cząstek we wnętrzu w wyniku spalania kadzidła. Zanik stężenia cząstek po nabożeństwach umożliwiał precyzyjne określenie udziału osiadania w spadku stężenia, podczas gdy okresy wysokich stężeń cząstek na zewnątrz i braku ich emisji wewnątrz umożliwiały precyzyjne określenie współczynników penetracji.



Rysunek 1. Stężenia liczbowe małych ( $0.3-1 \mu m$ ) i dużych (powyżej  $1 \mu m$ ) cząstek zmierzone wewnątrz i na zewnątrz kościoła. Dwa okresy niskiego stężenia liczbowego cząstek na zewnątrz (1 i 2) oraz jeden okres niskiego stężenia liczbowego cząstek na zewnątrz (3) posłużyły do określenia odpowiednio osiadania i penetracji cząstek. Zanik stężenia  $CO_2$  wprowadzonego przez oddechy ludzi posłużył do określenia wartości  $AER$  w tych okresach.

Opracowany model jest znacznym osiągnięciem w tej dziedzinie badań, gdyż umożliwia określenie wiarygodnych wartości współczynników osiadania i penetracji  $k$  i  $P$  w budynkach zabytkowych, kluczowych parametrów oceny zagrożenia wewnątrz brudzeniem, nawet gdy wymiana powietrza dominuje w procesie zaniku stężenia cząstek.



## **PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA BIS"**



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

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

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

Nośniki leków, których podstawowym elementem struktury są nanorurki węglowe, stanowią obiekt intensywnych prac badawczych ze względu na użyteczne właściwości fizykochemiczne i mechaniczne nanorurek. Interesującą koncepcją jest wykorzystanie nanorurek jako transporterów cząsteczek leku zamkniętego w ich wnętrzu czy też przyłączonego do ścianek bocznych. Dlatego celem tego etapu badań było modelowanie układów zawierających nanorurki węglowe, modelowe cząsteczki leków antynowotworowych (cisplatyna oraz doksorubicyna) oraz czynnik dodatkowy czuły na parametr środowiska i pozwalający na kontrolę struktury molekularnej układu. Skupiono się na wykorzystaniu zjawiska zmiany pH tkanki z fizjologicznego 7.4 na kwaśne ok. 5.5 jakie zachodzi w obrębie guza. Zjawisko to jest dobrze znane w literaturze a związane jest z przyspieszonym metabolizmem i niedoborem tlenu w tkance nowotworowej (hipoksja).

Badaniom poddano dwa typy układów: (i) nanorurka węglowa zablokowana kowalencyjnie nanocząstkami złota pokrytymi łącznikami zawierającymi wiązania hydrazonowe oraz (ii) nanorurka węglowa – cząsteczki barwników o  $pK_a$  w granicach 5 – 7. Zbadano około 10 różnych cząsteczek barwników, przy czym jedynie 4 z nich wykazywało mniej lub bardziej interesujące właściwości.

Wyniki przeprowadzonych obliczeń wskazują, że zastosowanie cząsteczek barwników, których rozkład ładunku zmienia się w okolicy  $pH = 5-7$  może być wykorzystany do kontrolowanego uwalniania leków z wnętrza nanorurek węglowych. Ko-adsorpcja barwników i doksorubicyny na ściankach bocznych nanorurek jest raczej mało efektywna. Jedynie dla czerwieni metylowej i czerwieni neutralnej można zaobserwować wiązanie doksorubicyny w pH neutralnym oraz jej uwalnianie w pH kwaśnym. Są to jednak efekty stosunkowo słabe. Znacznie bardziej obiecujące jest wykorzystanie efektu blokowania doksorubicyny we wnętrzu nanorurki przez warstwy barwnika wprowadzonego do nanorurki w drugim cyklu impregnacji. W tym przypadku uzyskano zaskakująco dobre wyniki, szczególnie przy zastosowaniu czerwieni neutralnej jako blokera. Również interesujące wyniki uzyskano dla p-fenyloaniliny, choć w tym przypadku stabilność układu w pH neutralnym jest dość niska. Wyniki uzyskane dla przypadku blokowania nanorurki przez kowalencyjnie związane nanocząstki złota prowadzą do bardzo obiecujących wniosków. Stwierdzono, że dysocjacja wiązań hydrazonowych w pH kwaśnym nie prowadzi do spontanicznego odblokowania nanorurki. Układy pozostają związane w wyniku silnych oddziaływań dyspersyjnych i sterycznych. Jednakże, obecność cisplatyny we wnętrzu nanorurki prowadzi do silnego obniżenia barier energetycznych związanych z odsuwaniem nanocząstek od czoł nanorurek. Ma to związek z tworzeniem przez cisplatynę fazy skondensowanej we wnętrzu nanorurki. To zaś nie pozwala na kotwiczenie łączników we wnętrzu nanorurki po dysocjacji wiązania hydrazonowego.

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 lysosomach 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 przeprojektowywanie enzymów**

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

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

W ramach tego projektu realizowane są ściśle powiązane ze sobą badania strukturalne, biochemiczne oraz obliczeniowe nad dwiema grupami dioksygenaz zależnych od 2-oksoglutaranu uczestniczących w biosyntezie alkaloidów tropanowych i morfinianowych: anizodaminy/skopolaminy (enzym H6H) oraz kodeiny/morfiny (enzymy CODM, T6ODM, PODA). Struktury tych białek nie są znane, tak jak szczegółowe mechanizmy ich reakcji katalitycznych.

Realizację projektu rozpoczęto w połowie 2015 roku. W ramach prowadzonych prac doświadczalnych testowano różne warunki produkcji białka, opracowano metodę analizy ilościowej i jakościowej produktów reakcji enzymatycznej H6H. Dla otrzymanego enzymu H6H potwierdzono aktywność katalityczną. W ramach prac obliczeniowych przebadano, z wykorzystaniem modeli klasterowych, mechanizm aktywacji tlenu prowadzący do reaktywnego układu ferrylowego oraz mechanizm demetylacji kodeiny.

## **PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA"**



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

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/01/D/ST5/04917 [2011-2015]

(kierownik projektu: dr Monika Góral-Kurbiel)

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

Badania przeprowadzone w 2015 roku obejmowały syntezę, charakteryzację właściwości fizykochemicznych katalizatorów palladowo-platynowych oraz badanie ich elektroaktywności w ORR. Zastosowanie metody mikroemulsji odwróconej (*ang. water-in-oil microemulsion*) umożliwiło syntezę katalizatorów o wąskim zakresie wielkości krystalitów metalu, ok. 6 nm. Tak uzyskane cząstki metalu zostały osadzone w matrycy PPY oraz dla porównania na komercyjnym węglu przewodzącym Vulcan XC-72. Polimer przewodzący otrzymano w wyniku chemicznej polimeryzacji w kwaśnym środowisku wodnym. Otrzymano szereg katalizatorów o stałej zawartości metalu, tj. 10 wt.% (optymalna zawartość metalu uzyskana na podstawie wcześniej przeprowadzonych badań) oraz różnym stosunku molowym Pd:Pt, tj.: 95:5, 90:10, 80:20, 90:10, 70:30, 50:50 i 30:70. Charakteryzowano je metodami BET, XRD, XRF, XPS, FTIR oraz TEM i HRTEM. Określono także aktywność elektrokatalityczną tych materiałów w reakcji ORR w 0.5 M  $H_2SO_4$  przy użyciu wirującej elektrody dyskowej z pierścieniem oraz voltamperometrii cyklicznej. Uzyskane wyniki pozwoliły na opracowanie optymalnego stosunku molowego Pd:Pt = 50:50 w badanych katalizatorach. Wykazały one wyższą aktywność i selektywność w reakcji redukcji tlenu niż nanocząstki Pt osadzone na węglu przewodzącym Vulcan XC-72 (układ powszechnie stosowany w ogniwach).

Kolejnym etapem badań w 2015 roku było zoptymalizowanie warunków syntezy nanokompozytów heteropolikwas – PPY, przy użyciu heteropolikwasów typu Keggina,  $H_3PW_{12}O_{40}$  i  $H_3PMo_{12}O_{40}$  oraz typu Dawsona  $H_6P_2W_{18}O_{62}$ . Polimer przewodzący otrzymano w wyniku chemicznej polimeryzacji pirolu w obecności HPA (stosunek molowy HPA:pirol=0,33) w środowisku  $CH_3NO_2$  i  $CH_3CN$ . Dodatkowo przeprowadzono wstępne badania, aby sprawdzić wpływ obecności HPA na aktywność katalizatora 10 wt.%  $Pd_{50}Pt_{50}/PPY$  w reakcji ORR. Metodą powszechnie stosowaną w celu przygotowania katalizatorów do zbadania ich elektroaktywności w ORR jest sporządzenie ich zawiesiny z Nafionem (czynnik wiążący). Tutaj dodatkowo wprowadzono HPA do zawiesiny badanego katalizatora nakropionej na powierzchnię elektrody. Modyfikacja katalizatora 10 wt.%  $Pd_{50}Pt_{50}/PPY$  za pomocą HPA, zwłaszcza  $H_3PMo_{12}O_{40}$  spowodowała wzrost jego aktywności w reakcji ORR. W związku z tym otrzymane kompozyty hybrydowe HPA – PPY zostaną wykorzystane w następnym etapie badań do syntezy katalizatorów Pd-Pt/HPA–PPY w celu sprawdzenia ich aktywności w reakcji ORR.

## 2. Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: modelowanie komputerowe

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

(kierownik projektu: dr hab. Wojciech Płaziński)

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

Celem badań było szczegółowe zbadanie dynamiki oraz termodynamiki przejść konformacyjnych (typu krzesło  ${}^1C_4 \leftrightarrow$  krzesło  ${}^4C_1$ ) w cząsteczkach wybranych cukrów, zbudowanych z sześcioczłonowych pierścieni (heksopiranoz). Konformacja pierścienia w cząsteczkach węglowodanów heksopiranozowych jest jednym z centralnych zagadnień glikobiologicznych. Konformery pierścieniowe determinują biologiczną funkcję i aktywność węglowodanów a dynamiczna równowaga pomiędzy poszczególnymi konformerami reguluje m.in. makroskopowe właściwości hydrodynamiczne policukrów.

Dokonano analizy właściwości kinetycznych przejść typu  ${}^4C_1 \rightarrow {}^1C_4$ ,  ${}^4C_1 \rightarrow B/S$  i  $B/S \rightarrow {}^1C_4$  oraz tych przebiegających w odwrotnym kierunku (gdzie B/S jest zbiorem konformacji typu 'łódka' lub 'łódka skręcona') dla monomerów  $\alpha$ - i  $\beta$ -glukozy. Analiza ta miała charakter wyznaczenia stałych szybkości poszczególnych etapów procesu inwersji pierścienia, jak i 'efektywnej' stałej szybkości dla całego procesu. Ponadto, w wyniku porównania z przewidywaniami teorii stanu przejściowego, wyznaczono odpowiednie współczynniki transmisji odpowiadające barierom energetycznym zdefiniowanym na podstawie parametru  $\theta$  Cremera-Pople'a. W odróżnieniu od poprzednich etapów badań, w ramach analizy kinetycznej przetestowano trzy różne pola siłowe: GROMOS 56a6<sub>CARBO</sub>, 53a6GLYC oraz GLYCAM06. Przewidywania pól 56a6<sub>CARBO</sub> oraz GLYCAM są zgodne z dostępnymi danymi eksperymentalnymi (należy zaznaczyć, iż dane te określają jedynie rząd wielkości czasu potrzebnego do zaobserwowania inwersji pierścienia, np. mikrosekundy dla przejścia  ${}^4C_1 \rightarrow {}^1C_4$ ). Zbyt wysokie bariery oddzielające poszczególne konformery pierścienia w polu 56a6GLYC efektywnie "zamrażają" konformację pierścienia na czas zbyt długi na obserwację inwersji w skali symulacji [np. ponad 1 mikrosekunda dla przejścia  ${}^1C_4 \rightarrow {}^4C_1$  w cząsteczce  $\beta$ -glukozy, czyli skala miesięcy (sic!) dla przejścia  ${}^4C_1 \rightarrow {}^1C_4$ ] co pozostaje w sprzeczności z danymi eksperymentalnymi.

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

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

(kierownik projektu: dr Krzysztof Szczepanowicz)

Nanokapsułki mogą być stosowane w specyficznych systemach dostarczania leków, ponieważ mają one zdolność przenikania przez błonę komórkową, ponadto, mogą one być specyficznie sfunkcjonalizowane co pozwoli na osiągnięcie tzw. „*intelligent targeting*”, czyli na uwalnianie leku w odpowiednim miejscu i czasie w organizmie, co zminimalizuje jedną z największych słabości stosowanych tradycyjnie preparatów leczniczych czyli 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 wcelowanego dostarczania leku tzw. "inteligentnego dostarczanie", czyli dostarczanie leku tylko do określonych miejsc, komórek lub narządów. Ostatnim krokiem będą testy biologiczne mające za zadanie zbadanie cytotoksyczności otrzymanych nośników oraz zweryfikowanie selektywnego działania przygotowanych kapsułek w modelu komórkowym. Prace prowadzone będą jednocześnie w dwóch ośrodkach posiadających odpowiednie doświadczenie oraz zaplecze sprzętowe niezbędne w tego typu badaniach: w IKiFP PAN oraz na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ.

W 2015 roku skupiono się na preparatyce oraz modyfikacji nanokapsułek zawierających makromolekularne czynniki aktywne. Rdzenie nanokapsułek otrzymano poprzez kompleksację Plazmidu DNA z przeciwnie naładowanym polielektrolitem. Taki makromolekularny kompleks (polipleks) został enkapsulowany w powłokach polielektrolitowych. Polielektrolitowe powłoki multiwarstwowe tworzono metodą sekwencyjnej adsorpcji polielektrolitów (metoda warstwa po warstwie), techniką saturacyjną. Do budowy powłok polielektrolitowych użyto biokompatybilnych oraz biodegradowalnych polielektrolitów poli(L-Lizyny) jako polikationu oraz Poli(kwasu glutaminowego) jako polianionu. Otrzymano nośniki o średnim rozmiarze 100nm, które następnie zmodyfikowano poprzez pegylację. Zsyntezowano pegylowane polielektrolity (PGA-g-PEG) z różnym stopniem wszczepienia oraz z różną długością łańcuchów PEG. Polielektrolity te użyto do utworzenia zewnętrznej pegylowanej warstwy nanokapsułek.

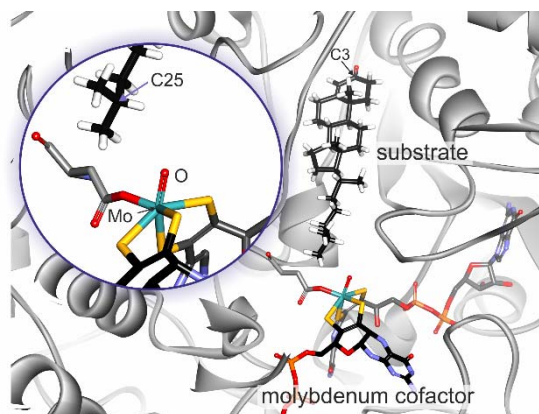
#### 4. Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium denitrificans*

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

(kierownik projektu: dr hab. Maciej Szaleniec)

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

Badania mechanizmu prowadzone są zarówno metodami teoretycznymi jak i eksperymentalnymi. W ramach teoretycznego modelowania kontynuowano badania z modelem homologicznym podjednostki  $\alpha$  enzymu. Korzystając ze struktur kompleksów enzym-substrat, które uzyskano w latach poprzednich przeprowadzono serię symulacji metodą MD, badając dynamikę wybranych substratów w centrum aktywnym S25DH. Symulacje te pozwoliły przeprowadzić wnikliwą analizę statystyczną istotnych parametrów konformacyjnych substratów, wyznaczyć energię swobodną wiązania substratów za pomocą metody Possiona-Boltzmana i Generalized Born oraz opisać ilościowo interakcje pomiędzy substratem a resztami aminokwasowymi centrum aktywnego.



Wyniki analiz konformacyjnych oraz energii swobodnej wiązania substratów uzyskane z symulacji dynamiki molekularnej dla odpowiednich modeli kompleksów enzym-substrat skorelowano z parametrami kinetycznymi 3 wybranych substratów. Badania te pozwoliły wykazać, że za obserwowane różnice w szybkości reakcji może odpowiadać sposób wiązania substratów w centrum aktywnym i związana z tym częstość występowania katalitycznie aktywnej konformacji substratu. Czynniki te mogą być odpowiedzialne za obserwowane w eksperymencie różnicowanie szybkości reakcji dla 3-ketosteroli (substraty szybciej konwertowane) i 3-OH-steroli oraz ich estrów (substraty wolniej hydroksylowane).

W kolejnym kroku uzyskano wyjściową strukturę modelu QM:MM i przeprowadzono wstępne badania ścieżki reakcji uzyskując struktury kompleksu ES, EP i produktu przejściowego. Uzyskane wyniki wykazały, że bardziej stabilna jest rodnikowa forma produktu przejściowego niż forma karbokationowa. Jest to wynik odmienny od tego, który obserwowano w przypadku dehydrogenazy etylobenzenowej. Na podstawie zoptymalizowanej metodą QM:MM struktury kompleksu enzym-substrat stworzono dwa modele klastrowe: i) model minimalny zawierający tylko kofaktor molibdenowy, resztę Asp koordynującą Mo oraz resztę lizyny tworzącą wiązanie wodorowe z Asp oraz fragment alkilowy substratu (83 atomy), ii) model rozszerzony o liczne reszty aminokwasowe okalające substrat (198 atomów). Za pomocą tych dwóch modeli rozpoczęto badania mechanizmu reakcji. Wstępne wyniki przeprowadzonych badań wykazują wyższe bariery reakcji niż dla EBDH (zgodnie z obserwowaną eksperymentalnie niższą szybkością reakcji), rodnikowy charakter produktu przejściowego oraz kwasi-karbokationowy charakter przeniesienia grupy OH. Wykazano również możliwość zachodzenia utleniającego odwodornienia substratu zamiast jego hydroksylacji.

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

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

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem badań realizowanych w ramach projektu jest określenie mechanizmu decydującego o prawdopodobieństwie odbić pojedynczego pęcherzyka gazowego, zderzającego się z powierzchnią czystych cieczy. Badania skupiają się elementarnych zjawiskach, które decydują o stabilności ciekłych filmów tworzących się na granicy międzyfazowej ciecz/gaz w warunkach dynamicznych. W celu weryfikacji zakładanych hipotez, w prowadzonych badaniach używany jest unikatowy zestaw eksperymentalny, który umożliwia obserwację dynamicznych zjawisk zachodzących podczas zderzeń pojedynczych pęcherzyków gazowych z powierzchnią ciecz/gaz pozostającą w spoczynku lub też wibrującą z kontrolowanym przyspieszeniem (częstotliwością i amplitudą). Zestaw ten składał się z: (i) kolumny o przekroju kwadratowym, w dnie której zamocowana była kapilara o średnicach z przedziału 0.025-0.15 mm, (ii) szybkiej kamery cyfrowej rejestrującej obrazy z częstotliwością 1000-5000 klatek na sekundę, (iii) systemu precyzyjnego dozowania gazu (pompa strzykawkowa) oraz (iv) aparatury pozwalająca na indukcję kontrolowanych zaburzeń (drgań) powierzchni międzyfazowych, tj. elektromagnetycznego shakera oraz generatora fal do kontroli częstotliwości i amplitudy i akcelerometru.

W okresie sprawozdawczym przeprowadzono badania 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. Generacja pęcherzyków odbywała się za pomocą precyzyjnego układu dozowania gazu, który pozwalał na kontrolę częstotliwości odrywania się pęcherzyków. W okresie sprawozdawczym pomiary prowadzono dla czystych olejów silikonowych o precyzyjnie zdefiniowanych parametrach fizykochemicznych (lepkość i napięcie powierzchniowe). Dzięki zastosowaniu różnych rozmiarów kapilar (średnica wewnętrzna 0.025-0.15 mm) średnica utworzonych pęcherzyków oscylowała w przedziale 0.60-1.2 mm. Wykazano, że dla każdego rozmiaru pęcherzyka istnieje określona wartość amplitudy i częstotliwości drgań powierzchni olej/powietrze (czyli przyspieszenia nadmiarowego), poniżej której czas życia (koalescencji) pęcherzyka jest porównywalny z czasem dla powierzchni swobodnej (spoczywającej), powyżej której natomiast ulega on znacznemu wydłużeniu nawet o kilka rzędów wielkości. Ponadto stwierdzono, że im większa jest średnica pęcherzyka tym mniejsze przyspieszenie potrzebne jest do tego, aby uzyskać efekt wydłużenia czasu koalescencji. Obserwacja ta jest dodatkowym potwierdzeniem postulowanego mechanizmu odbić pęcherzyka od powierzchni międzyfazowej, w której rozmiar powstającego filmu ciekłego, determinowany zdolnością pęcherzyka do deformacji, jest parametrem o kluczowym znaczeniu. Większy pęcherzyk, z uwagi na mniejsze ciśnienie panujące w jego wnętrzu (ciśnienie Laplace'a), ulegał większej deformacji już przy niewielkim przyspieszeniu powierzchni międzyfazowej, przez co ciekły film miał większy promień. Powodowało to, że potrzebował znacznie dłuższego czasu to tego, aby osiągnąć krytyczną grubość pęknięcia, co powodowało wzrost prawdopodobieństwa odbicia pęcherzyka od powierzchni.

## **6. Nowe biwarstwowe układy białkowe oparte na oddziaływaniach antygen- przeciwciało – charakterystyka fizykochemiczna *in situ***

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2014/13/D/ST4/01846 [2015-2017]

(kierownik projektu: dr Monika Wasilewska)

Istotnym obszarem zastosowań białek immobilizowanych na powierzchniach stałych w postaci aktywnych warstewek są testy immunologiczne, zapewniające precyzyjne i selektywne wykrywanie specyficznych białek występujących w roztworze ciekłym. Zazwyczaj zaadsorbowanymi białkami są immunoglobuliny typu G, lub ich aktywne fragmenty, wykazujące specyficzne powinowactwo do białek – antygenów.

Pomimo szczególnie ważnej roli, jaką pełnią immunoglobuliny mechanizm procesu immobilizacji tych białek nie jest w pełni poznany. Systematyczne ilościowe badania w warunkach *in situ* w tym obszarze nie były dotychczas prowadzone. Szczególnie odczuwany jest brak badań związanych z procesem adsorpcji immunoglobulin na monowarstwach białek. Dlatego też głównym celem naukowym niniejszego projektu jest opracowanie efektywnej procedury pomiarowej pozwalającej na detekcję śladowych ilości przeciwciał obecnych w fazie ciekłej, opartej na pomiarach potencjału przepływu biwarstw białkowych (fibrynogen/IgG) utworzonych na zasadzie oddziaływań antygen- przeciwciało.

Głównym zadaniem badawczym realizowanym w omawianym okresie sprawozdawczym była charakterystyka fizykochemiczna białka IgG w roztworach elektrolitów. Określenie wpływu siły jonowej oraz pH roztworu na właściwości elektrokinetyczne (ruchliwość elektroforetyczną, współczynnik dyfuzji, punkt izoelektryczny, ładunek nieskompensowany, stabilność) białek. Dodatkowo przeprowadzono preparatykę oraz charakterystykę immunoglobulin G znaczonych barwnikiem fluorescencyjnym.

Kolejnym istotnym zagadnieniem realizowanym w niniejszym projekcie jest modelowanie teoretyczne tworzenia biwarstwy białkowej. W pierwszym etapie prowadzonych prac skupiono się na opracowaniu koncepcji symulacji polegającej na redukcji problemu trójwymiarowego do sytuacji dwuwymiarowej, polegającej na adsorpcji molekuł IgG na losowo rozmieszczonych centrach adsorpcyjnych pochodzących od uprzednio zaadsorbowanego fibrynogenu.

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



# **1. Opracowanie technologii wytwarzania stabilnej i łatwo biodegradowalnej piany ciekłej do zastosowań przemysłowych i biomedycznych**

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/01/B/ST8/03717 [2011-2015]

(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

Celem projektu było opracowanie technologii wytwarzania bio-insprowanej, łatwo degradowalnej piany na bazie polisacharydów i/lub białek, stabilizowanej rozproszonymi mikro-, nano- lub koloidalnymi cząstkami. Cząstki jako składniki powinny blokować wyciekanie płynu z warstwy filmu zwiększając stabilność piany, sprężystość oraz granicę plastyczności.

W trakcie projektu wykonano szereg pomiarów pianotwórczości i stabilności pianowej w kolumnie szklanej dla mieszanin badanych biopolimerów z różnymi, wybranymi cząstkami stałymi. W kolumnie badano automatycznie zmiany wysokości słupów piany i cieczy w czasie, bezpośrednio od momentu rozproszenia powietrza w roztworze aż do chwili zaniku fazy pianowej. Przyjmuje się, że początkowa wysokość frakcji pianowej charakteryzuje zdolności pianotwórcze badanego roztworu, czyli zdolność badanego układu do wytworzenia piany. Natomiast stabilność piany jest opisywana przez tempo zaniku piany. Pomiary pianotwórczości korelowano z prowadzonymi równocześnie badaniami zmian dynamicznego i równowagowego napięcia powierzchniowego oraz zmianami elastyczności powierzchniowej badanych roztworów.

Pomiary lepkościowo-elastyczne wykonane w reometrze rotacyjnym pozwoliły określić sprężystość, lepkość i granicę plastyczności pod wpływem zastosowanego naprężenia, co określiło przydatność otrzymanej piany do danych zastosowań biomedycznych lub przemysłowych. Dodatkowe pomiary przewodności i obserwacje mikroskopowe dostarczyły informacji o ciekłej frakcji pianowej, strukturze pęcherzyków gazowych i dynamice materiału w trakcie starzenia się piany. Wybrane piany o najlepszych parametrach podlegały bardziej szczegółowej analizie, pozwalającej na wyznaczenie w warunkach równowagowych stabilności i grubości cienkich filmów.

Wykazano, że jest możliwe opracowanie technologii umożliwiającej uzyskanie stabilnej mokrej piany biologicznej. Właściwości mechaniczne i fizykochemiczne filmów pianowych poprawialiśmy na dwóch różnych drogach. Po pierwsze, do roztworów białek i polisacharydów dodawano kontrolowane niewielkie śladowe ilości syntetycznych, nietoksycznych i hypoalergiczných surfaktantów. Po drugie, dotowano te roztwory dodatkiem hydrofilowych cząstek koloidalnej krzemionki. Udowodniono, że każda z w/w dróg prowadzi do wytworzenia pian o dużej stabilności. Cząstki mają tendencję do agregacji w fazie wodnej, co w konsekwencji ogranicza ich zdolność do adsorpcji na granicy faz i zapobiega koalescencji oraz dyfuzji gazowej. Gromadzenie się cząstek w filmie pianowym dodatkowo blokuje wyciekanie cieczy. Dzięki temu piany z cząstkami są bardziej sprężyste i stabilne w porównaniu do takiej samej frakcji pianowej bez cząstek. Udowodniliśmy, że w wyniku wzajemnych interakcji między cząsteczkami białek, polisacharydów i koloidalnych cząstek w badanych roztworach powstają filmy powierzchniowe o nowych, nieznanych wcześniej powierzchniowych właściwościach fizykochemicznych.

Biologiczne, łatwo biodegradowalne układy pianowe opracowane w trakcie projektu mogą mieć szerokie zastosowanie jako alternatywa do używanych obecnie pian na bazie syntetycznych surfaktantów. Dzięki unikalnym i specyficznym cechom niektórych naturalnych polisacharydów i białek będą również mogły być użyte w aplikacjach farmaceutycznych, kosmetycznych, pielęgnacji ciała i biomedycznych. Mokre piany zbudowane na podstawie roztworów chitosanu mogłyby być użyte jako niekonwencjonalne środki do sterylnych opatrunków zapobiegających infekcjom i tworzeniu się pęcherzy w trakcie bezbolesnego leczenia ran.

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

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

(kierownik projektu: dr Katarzyna Pamin)

Celem badań jest zastosowanie gliceryny lub jej pochodnych jako rozpuszczalników w reakcji utleniania fenoli wodą utlenioną w obecności kompleksów metali przejściowych jako katalizatorów. Utlenianie fenolu do hydrochinonu i katecholu jest ważną na skalę przemysłową reakcją i ponadto służy jako metoda przetwarzania zanieczyszczeń fenolowych w związki łatwe do usunięcia ze środowiska naturalnego. Kompleksy metali są znane jako wydajne katalizatory reakcji utleniania i dlatego zostały wybrane jako katalizatory reakcji utleniania fenoli wodą utlenioną w glicerynie.

Obecne badania mają na celu wyjaśnienie w jaki sposób zastosowanie gliceryny jako alternatywnego rozpuszczalnika wpłynie na aktywność katalityczną jonowych porfiryn kobaltu, manganu i żelaza w reakcji utleniania fenolu w fazie ciekłej. Kationowe MnTMPyP, CoTMPyP, FeTMPyP i anionowe MnTPPS, CoTPPS, FeTPPS metaloporfiryny zostały zsyntezowane, scharakteryzowane i zastosowane w reakcji utleniania fenolu w obecności  $H_2O_2$  w termostatowanym szklanym reaktorze w temp. 80°C przez 1 godzinę. Otrzymane próbki zostały scharakteryzowane za pomocą spektroskopii FTIR, UV-Vis oraz cyklicznej woltametrii.

Wszystkie otrzymane katalizatory były aktywne w badanej reakcji i ich aktywność katalityczna zależy od natury centrów aktywnych. Dla obu serii katalitycznych najwyższa aktywność katalityczna obserwowana jest dla kompleksów żelazowych. Nie jest zaskakujące, że katalizatory żelazowe są wykazują najwyższą aktywność w tej reakcji ponieważ w utlenianiu fenolu za pomocą reagentów Fentona żelazo odgrywa kluczową rolę. Katalityczne badania aktywności metaloporfiryn jonowych w reakcji utleniania fenolu w glicerynie jako rozpuszczalniku pokazały, że gliceryna może być alternatywą dla lotnych rozpuszczalników organicznych. Badania te mogą pomóc w zastąpieniu toksycznych rozpuszczalników organicznych przyjaznymi i "zielonymi" rozpuszczalnikami, takimi jak gliceryna.

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

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

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

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

Obiektem badań były układy o różnej geometrii i składzie chemicznym a jako modelowe układy przebadano heteropolikwasy fosforowo-molibdenowe i fosforo-wolframowe modyfikowane jonami miedzi Cu-HPA. Zsyntezowane i scharakteryzowane zostały układy: i) bazujące na strukturze anionów Keggina, o wzorze ogólnym  $\text{PMe}_{12}\text{O}_{40}^{n-}$  ii) układy oparte na zdeformowanych (laskularnych) anionach Keggina i Dawsona, ze struktury których usunięto atom(y) addenda i tlen(y) o wzorze ogólnym  $\text{PMe}_{11}\text{O}_{39}^{n-}$  czy  $\text{P}_2\text{Me}_{18}\text{O}_{62}^{n-}$ , iii) materiały typu „sandwicz” (m.in. o strukturze Weakly & Finke), w których jony miedzi tworzą klastry metaliczne pomiędzy dwoma zdeformowanymi anionami Keggina iv) sole miedziowe heteropolikwasów o różnej zawartości jonów miedzi.

Struktura elektronowa układów wyznaczona została poprzez obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT (funkcjonał gradientowy PBE i hybrydowy B3LYP). Obliczenia przeprowadzono przy użyciu modelu klasterowego (program Turbomole). Do pełnej charakterystyki wyznaczone zostały szczegółowe mapy gęstości stanów, widma IR, mapy gęstości spinowej. Szczegółową analizę mechanizmu oddziaływania badanych układów z małymi cząsteczkami m.in.  $\text{O}_2$ , NO, przeprowadzono przy zastosowaniu analizy NOCV. Wpływ rozpuszczalnika został uwzględniony poprzez zastosowanie przybliżenia COSMO, w którym cząsteczka reagenta zostaje umieszczona we wnęce utworzonej przez rozpuszczalnik o określonej stałej dielektrycznej.

Przeprowadzone obliczenia pokazały, że wprowadzenie jonów miedzi do struktury heteropolikwasów skutkuje, pojawieniem się orbitali  $3d$  Cu w pobliżu poziomu Fermiego. Zarówno ładunek jak i gęstość spinowa na jonach Cu, wbudowanych w strukturę badanych heteropolikwasów, zależy zarówno od geometrii anionu jak i rodzaju (Mo/W) pozostałych atomów addenda. Modelując procesy oddziaływania jonów Cu z małymi cząsteczkami (roztwarzalnika, substratów nieorganicznych) wykazano, że cząsteczki roztwarzalnika, np.  $\text{CH}_3\text{CN}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , nie adsorbują się na jonach Cu, które wbudowane w strukturę anionów HPA, wykazują tendencję do pozostania w formie pięcio-koordynacyjnej. Sprzyja to adsorpcji na centrum metalicznym cząsteczek np.  $\text{OOH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , NO. Szczegółowa analiza mechanizmów oddziaływania między Cu-cząsteczka, wskazuje że oddziaływanie to jest efektem procesów donacji i donacji zwrotnej, przy czym przepływ elektronów w procesie donacji zwrotnej jest zazwyczaj znacznie większy niż w procesie donacji.

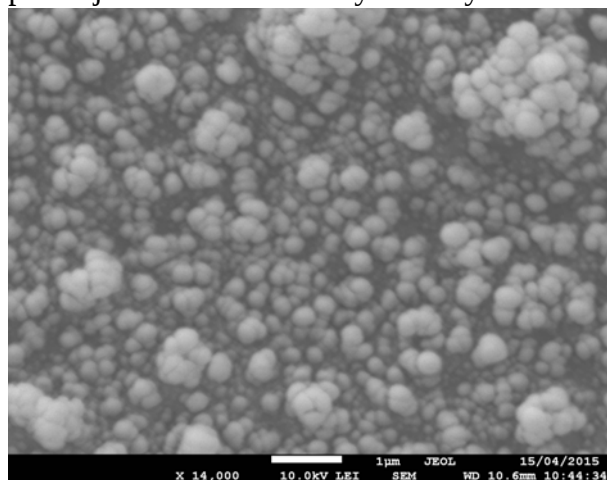
Badanie teoretyczne prowadzone były równorzędnie z badaniami eksperymentalnymi obejmującymi syntezę i charakterystykę właściwości fizykochemicznych modyfikowanych heteropolikwasów. Katalizatory badane były w reakcji odwadniania etanolu, w fazie gazowej, w zakresie temp. od  $90$ - $310^\circ\text{C}$  i w reakcji utleniania etanolu w tym samym zakresie temperatur. Przeprowadzone doświadczenia wykazały niską aktywność badanych układów w badanych reakcjach, w całym uwzględnionym zakresie temperatur. Największą aktywność spośród badanych układów wykazały sole miedziowe.

#### 4. Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant - polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanonośników

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

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Celem projektu jest określenie mechanizmu tworzenia kompleksów jon surfaktantu – polielektrolit celem zastosowania ich w procesie tworzenia nanokapsulek. Badano surfaktanty zawierające wiązanie –O-CO- pomiędzy aminą czwartorzędową a łańcuchem węglowodorowym: (DMM-11) i (DMP2M-11)), i pochodne z wiązaniem –CO-O- : (DMGM-12)), i (DMALM-12)). Pochodne te są stabilne w warunkach kwaśnych, lecz w neutralnych i alkalicznych ulegają hydrolizie, w wyniku której powstają jako substancje powierzchniowo aktywne kwas dodecyłowy i dodekanol. Do opisu aktywności powierzchniowej surfaktantów i wpływu hydrolizy zastosowano rozszerzony model "dwuwymiarowego elektrolitu powierzchniowego" (STDE). Otrzymano dobry teoretyczny opis wyników doświadczalnych. Stwierdzono, że aktywność powierzchniowa mieszaniny powstałej z powodu zachodzenia procesu hydrolizy, rośnie w czasie i jest wyższa dla pochodnych z wiązaniem -O-CO- w porównaniu z odwrotnym położeniem grupy w przypadku pochodnych z wiązaniem –CO-O-. Jest to konsekwencją silnego synergetycznego oddziaływania pomiędzy esterquatem i anionowym produktem hydrolizy – jonem dodekanianowym. Stwierdzono, że dodatkowa grupa CH<sub>3</sub> przy grupie amoniowej prowadzi do obniżenia aktywności powierzchniowej mieszaniny. Dane dotyczące izoterm adsorpcji uzyskano na podstawie kinetycznych pomiarów napięcia powierzchniowego czystych surfaktantów i ich mieszanin z polielektrolitami. Dane te pozwalają na określenie zakresu stężeń surfaktantu i polielektrolitu, w którym tworzony jest kompleks polielektrolitu z surfaktantem. Największy efekt synergetycznego oddziaływania surfaktantu i polianionu obserwuje się dla najsłabiej hydrolizującego DMALM-12, najsłabszy w przypadku najszybciej hydrolizującego DMM-11, gdzie ładunek surfaktantu jest neutralizowany przez jony dodekanianowe. Mieszaniny surfaktant /alginina wykazują wyższą aktywność powierzchniową niż mieszaniny surfaktantu z PSS. Aktywność powierzchniowa kompleksów DMGM-12/ PAA (PGA lub CAR) jest podobna. Jako rdzenie mikrokapsulek służyły micelle wybranych surfaktantów. Kapsułki budowano poprzez sekwencyjną adsorpcję przeciwnie naładowanych polielektrolitów (LBL). Fizykochemiczne własności kapsulek określano stosując metodę dynamicznego rozpraszania światła DLS, pomiary potencjału zeta i AFM. Przykładowy obraz SEM kapsulek przedstawiono poniżej.



Głównymi osiągnięciami projektu jest określenie wpływu struktury surfaktantu, rodzaju wprowadzonych grup (estrowych) na mechanizm adsorpcji tych pochodnych i zdolność do tworzenia kompleksu jon surfaktantu - polielektrolit. Rozwinięcie modelu teoretycznego oddziaływań surfaktant-polielektrolit umożliwi przewidywanie własności kompleksów, co prowadzi do ich lepszego doboru w zależności od praktycznych zastosowań.

## 5. Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktionu - badania doświadczalne i obliczeniowe

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/03/B/NZ1/04999 [2012-2016]

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

Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury oraz mechanizmu reakcji katalitycznej dioksygenaz acireduktionu (ARD) – metaloenzymów szeroko rozpowszechnionych w przyrodzie i odpowiedzialnych za jeden z etapów recyklingu metioniny. Enzymy te wykazują unikalną zależność specyficzności reakcji katalitycznej oraz struktury od rodzaju metalu związanego w miejscu aktywnym.

Realizowane prace obejmują biosyntezę i oczyszczanie badanych enzymów, badania kinetyczne reakcji katalitycznej, krystalizację enzymów oraz modelowanie molekularne. W poprzednich latach opracowano metodę otrzymywania enzymu z wybranym metalem przejściowym, opracowano metodę HPLC do identyfikacji i ilościowego oznaczania organicznych produktów reakcji katalitycznych Fe-ARD oraz Ni-ARD, zbadano stechiometrię reakcji katalitycznych, wykonano pomiary spektroskopią Mossbauera dla formy natywnej oraz w kompleksie z substratem, wykryto i rozwiązano strukturę enzymu, oraz wykonano badania obliczeniowe nad mechanizmami reakcji dwóch syntetycznych kompleksów nieorganicznych, które katalizują reakcje modelowe dla ARD.

W roku ubiegłym badania doświadczalne rozszerzono o: a) synchrotronowe pomiary widm nieelastycznego rozpraszania promieni X (NIS/NRVS), które zostały wykonane w ESRF (Grenoble) dla natywnej postaci Fe-ARD oraz jego kompleksu z modelowym substratem; b) opracowanie metody produkcji białka na podłożu minimalnym wzbogaconym o izotop  $^{57}\text{Fe}$ ; c) dopracowanie metody syntezy stabilnej formy substratu dla enzymu ARD oraz jego spektralna i strukturalna charakterystyka. Badania obliczeniowe obejmowały: a) obliczenia widm oscylacyjnych, elektronowych oraz NMR dla substratu enzymu; b) symulacje dynamiki molekularnej dla Fe-ARD i jego kompleksu z substratem; c) obliczenia parametrów spektroskopowych (Mossbauer'a) dla modeli miejsca aktywnego Fe-ARD; d) badania ścieżek reakcji dla enzymu ARD. Synteza uzyskanych wyników doświadczalnych i obliczeniowych pozwoliła na postawienie nowej hipotezy tłumaczącej zależność kierunku przebiegu reakcji enzymatycznej ARD od rodzaju jonu metalu związanego w centrum aktywnym. Według tej hipotezy, kluczowe znaczenie ma potencjał redoks jonu, i tak  $\text{Fe}^{2+}$  pełni rolę donora elektronu na kluczowym etapie reakcji - podczas rozcięcia wiązania O-O, przez co umożliwia mechanizm przebiegający z homolitycznym rozcięciem tego wiązania, co prowadzi do produktów obserwowanych dla Fe-ARD. Inne jony, np.  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ , mają dużo wyższy potencjał redoks (dla pary z jonem trójwartościowym), przez co nie aktywują kanału rodnikowego i w efekcie proces rozcięcia wiązania O-O jest procesem heterolitycznym sprzężonym z transformacją substratu do produktów charakterystycznych dla Ni-ARD. Dodatkowo, wykonano badania obliczeniowe nad mechanizmem reakcji nitroksygenacji katalizowanej przez dioksygenazę kwercytyny - enzymu katalizującego reakcję bardzo zbliżoną do tej charakterystycznej dla Ni-ARD.

## 6. Badania chemii powierzchni katalizatorów hybrydowych jako droga do wyjaśnienia ich właściwości katalitycznych w wysokociśnieniowej reakcji syntezy eteru dimetylowego z mieszaniny $H_2/CO_2$

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

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

Celem niniejszego projektu jest wyjaśnienie zależności pomiędzy właściwościami układu katalitycznego a jego działaniem w oparciu o reakcję syntezy eteru dimetylowego (DME) z mieszaniny  $H_2/CO_2$ .

Prace w ramach tego projektu kontynuowano w 2015 roku. Katalizatory o składzie 10moliCu/90moliZrO<sub>2</sub>, otrzymane w wyniku współstrącania (przy użyciu różnych czynników strącających: Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, NaOH), jak i metodą cytrynianową były modyfikowane promotorami metalicznymi Ga, Mn, Cr, Ag, w ilości 3%wag. Tak otrzymane próbki scharakteryzowano metodami: H<sub>2</sub>TPR, BET, specyficzną adsorpcją N<sub>2</sub>O (powierzchnia właściwa Cu) oraz XRD. Dla badanych katalizatorów zaobserwowano zmiany we właściwościach redukcyjnych, teksturalnych oraz w wielkości powierzchni właściwej miedzi. Zmiany te zależą zarówno od metody preparatyki, jak i rodzaju wprowadzonego promotora metalicznego. Dodatek promotora prowadzi do zmian w profilu redukcji i do obniżenia temperatury maksimum redukcji. Zmiany w powierzchni właściwej BET, w zależności od metody preparatyki, opisuje poniższa nierówność:

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

Wprowadzenie promotorów zwiększa powierzchnie właściwe dla preparatów otrzymanych metodą NaOH; w przypadku pozostałych katalizatorów albo jej nie zmienia (metoda z Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>), albo wpływ dodatków nie jest jednoznaczny. Katalizatory otrzymane metodą z NaOH wykazują najwyższą objętość porów.

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

Testy katalityczne prowadzone były na katalizatorach hybrydowych składających się z części metalicznej CuZrO<sub>2</sub> dotowanej jednym z promotorów: Ag, Cr, Mn, lub Ga oraz z części kwasowej, którą był montmorylonit z naniesionym heteropolikwasem molibdenowym (HPMo) lub wolframowym (HPW). Dotychczas najlepsze wyniki uzyskano dla katalizatorów hybrydowych otrzymanych metodą NaOH, domieszkowanych Ga lub Cr, w których funkcję kwasową pełnił montmorylonit modyfikowany HPW. Konwersja dwutlenku węgla jest najwyższa dla katalizatorów hybrydowych, w których część metaliczna była otrzymywana metodą NaOH. Testy katalityczne na katalizatorach hybrydowych pokazały, że wprowadzenie promotorów Ga i Cr do składowej metalicznej oraz modyfikacja funkcji kwasowej zwiększa wydajność tych katalizatorów; co więcej, odpowiednia ich kombinacja może służyć jako podstawa do otrzymywania katalizatora o znaczeniu przemysłowym..

Ponadto, w ramach niniejszego projektu rozbudowano i unowocześniono istniejącą aparaturę próżniową do badań w podczerwieni cząstek zaadsorbowanych. Jest ona aktualnie używana do określenia zmian, które wprowadza naniesienie heteropolikwasu na montmorylonit K-10. W ramach tych badań przeprowadzono adsorpcję metanolu na powierzchni składowej kwasowej katalizatora hybrydowego i wykonano widma IR tak zaadsorbowanego metanolu. Badania te pokazały, że heteropolikwas zmienia właściwości kwasowe montmorylonitu i ma wpływ na reakcję następczą odwadniania metanolu do DME; HPW/K10 lepiej spełnia tą rolę niż HPMo/K10.

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

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST5/00771 [2013-2016]

(kierownik projektu: prof. Bogdan Sulikowski)

Projekt dotyczy otrzymywania i scharakteryzowania pod względem fizykochemicznym i katalitycznym nowych materiałów o hierarchicznej strukturze porowatej. Podstawowym celem poznawczym jest opracowanie nowej, efektywnej procedury otrzymywania materiałów glinokrzemianowych o multimodalnej strukturze porowatej, w oparciu o wcześniej zsyntetyzowane zawiesiny cząstek protozeolitowych. Nowoczesne materiały tego typu będą mogły znaleźć w przyszłości zastosowanie między innymi jako efektywne katalizatory do procesów transformacji cząsteczek organicznych w fazie ciekłej.

Po opanowaniu procedury syntezy zawiesin cząstek zawierających glin, przystąpiono do opracowania procedury prowadzącej do stabilnych, monodispersyjnych zawiesin nanocząstek protozeolitowych zawierających wyłącznie żelazo i krzem. Założono, że wprowadzenie żelaza powinno wygenerować centra kwasowe protonowe o mocy niższej niż moc analogicznych centrów w strukturach zawierających krzem i glin. Opracowano syntezę stabilnej zawiesiny nanocząstek zeolitu Fe-MFI o module krzemowym 54 i wielkości cząstek ok. 14 nm. Koloidalna zawiesina charakteryzowała się niewielkim stopniem polidispersyjności. Z uwagi na mniejszą stabilność sieciowych jonów  $\text{Fe}^{3+}$  w strukturach żelazo-krzemowych stosowano niższe temperatury kalcynacji, jak również prowadzono kalcynacje w atmosferze ozonu. Podjęto też próby usuwania szablonów organicznych za pomocą ekstrakcji alkoholem.

Zawiesiny protozeolityczne o zmiennej zawartości glinu i żelaza wykorzystano do syntezy mezoporowatych struktur lamelarnych. Zbadano je pod względem fizykochemicznym za pomocą szeregu metod, pozwalających na określenie morfologii, struktury, właściwości adsorpcyjnych i kwasowych. Pomiary niskotemperaturowej sorpcji azotu wykazały, że otrzymane materiały charakteryzowała izoterma adsorpcji typu IV charakterystyczna dla materiałów mezoporowatych, w których następuje adsorpcja wielowarstwowa oraz kondensacja kapilarna w mezoporach. Kształt pętli histerezy typu H4 potwierdził obecność mezoporów szczelinowych znajdujących się pomiędzy warstwami. Równocześnie w otrzymanych materiałach warstwowych stwierdzono obecność mikroporów, podobnie jak w standardowych zeolitach. Wykonano pomiary NMR dla jąder krzemu i glinu. Wykazano, że podczas kalcynowania zachodzi proces częściowego dealuminiowania preparatów. Określono ilość glinu znajdującego się w różnych koordynacjach. Wykonano dwuwymiarowe widma glinu metodą 3MQ MAS NMR i określono stałe oddziaływania kwadrupolowego.

Dla serii preparatów mezoporowatych wykonano testy katalityczne w fazie ciekłej. Zbadano transformację  $\alpha$ -pinenu w zakresie temperatur 50-120°C. Stwierdzono, że warunkiem koniecznym do transformacji  $\alpha$ -pinenu jest obecność w katalizatorze kwasowych centrów protonowych. Wykazano zależność konwersji  $\alpha$ -pinenu od zawartości glinu w warstwowych materiałach mezoporowatych. Aktywność i selektywność przemian  $\alpha$ -pinenu na materiałach mezoporowatych porównano z właściwościami katalitycznymi wykazywanymi przez standardowy zeolit ZSM-5 o kryształach wielkości mikronowej, glinokrzemian amorficzny oraz  $\gamma$ -tlenek glinu. Aktywność preparatów mezoporowatych zawierających nanocząstki protozeolityczne zdecydowanie przewyższała aktywność amorficznego glinokrzemianu i zeolitu ZSM-5.

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

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

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

Zgodnie z harmonogramem projektu badawczego (Planem zadań) realizowano następujące zadania badawcze:

### 1. Zakup aparatury (zadanie zakończone):

W ramach zadania zakupiono:

- a) Suszarkę próżniową z oprzyrządowaniem (pompą próżniową, połączeniami wymaganymi przy stosowaniu próżni)
- b) Biuretę do precyzyjnego dozowania wodoru
- c) Urządzenie do pobierania próbek

### 2. Synteza zmodyfikowanych nośników (zadanie zakończone):

Przygotowano 3 nośniki polimerowe modyfikowane aminami chiralnymi, tj. (S,S-1,2-dwufenyloetylenodiaminą, R,R-1,2-dwufenyloetylenodiaminą oraz (1S,2S)-N,N'-dimetylo-1,2-difenyl-1,2-etylenodiaminą.

### 3. Charakterystyka zmodyfikowanych nośników (zadanie zakończone)

Zmodyfikowane nośniki zostały scharakteryzowane z zastosowaniem techniki skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM, EDS, STEM), spektroskopii w zakresie podczerwieni (FT-IR), dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD).

### 4. Synteza katalizatorów rutenowych (zadanie zakończone)

Wykonano syntezę katalizatorów Ru(0) osadzonych na zmodyfikowanych żywicach polimerowych.

### 5. Charakterystyka katalizatorów rutenowych (zadanie zakończone)

Katalizatory rutenowe zostały scharakteryzowane z zastosowaniem techniki skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM, EDS, STEM), spektroskopii w zakresie podczerwieni (FT-IR), dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD), wysokorozdzielczej transmisyjnej mikroskopii elektronowej (HRTEM) oraz rentgenowskiej spektrometrii fotoelektronów (XPS).

### 6. Badania katalityczne (zadanie w trakcie realizacji)

Badania katalityczne objęły optymalizację warunków uwodornienia 8 ketonów (acetofenonu, acetolu, ketonu etylowo-metylowego, ketonu cykloheksylo-metylowego, ketonu etylowo-fenylo-metylowego, metyloacetofenonu (grupa CH<sub>3</sub> w pozycji orto, meta i para).

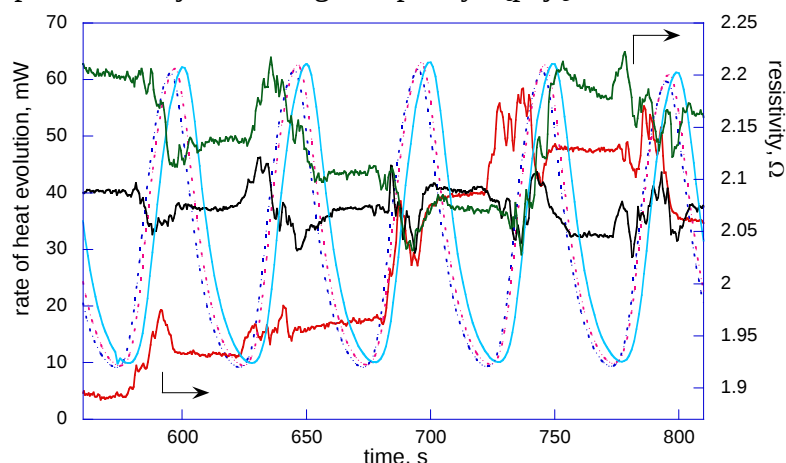
## 9. Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór

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

(kierownik projektu: dr Erwin Lalik)

Przeprowadzono pomiary parametrów elektrycznych in situ podczas oscylacyjnej sorpcji wodoru i deuteru w metalicznym proszku palladowym. Specjalnie przystosowana celka mikrokalorymetryczna umożliwiła użycie spektroskopii impedancji i chronoamperometrii do mierzenia zmian oporności i przewodności sproszkowanej próbki Pd równocześnie z oscylacjami termokinetycznymi towarzyszącymi sorpcji wodoru. Przeprowadzono szereg cykli sorpcji/desorpcji.

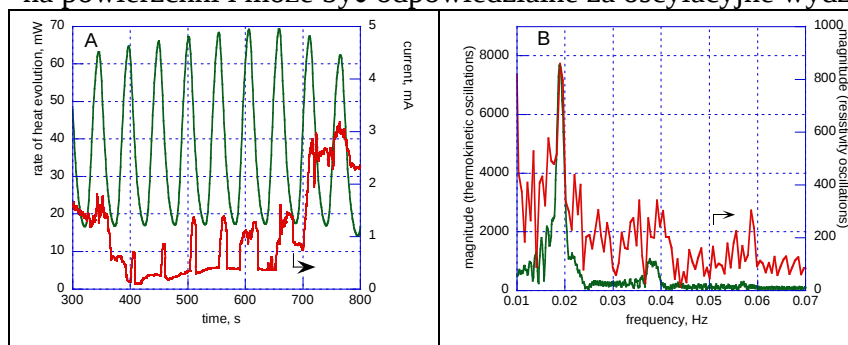
**Rysunek 1.** pokazuje aperiodyczność zmian oporności Pd w porównaniu do periodycznych oscylacji prędkości wydzielania ciepła w sorpcji D<sub>2</sub> w Pd.. Rysunek pokazuje dane z trzech eksperymentów. W przeciwieństwie do ścisłej powtarzalności częstotliwości oscylacji termokinetycznych (linia niebieska i linie przerywane), zmiany oporności (ciągłe linie czerwona, zielona i czarna) są jedynie względnie powtarzalne; pewne elementy ich krzywych wydają się skorelowane z częstotliwością termokinetyczną. Te elementy mogą składać się z wzrostów lub spadków, ale jedno i drugie współwystępują z wznoszeniem się krzywej termokinetycznej.



Rysunek 1. Chaos (deterministyczny) zmian oporności proszku Pd (ciągłe linie czerwona, zielona i czarna) towarzyszących oscylacjom termokinetycznym (ciągła niebieska linia i linie przerywane) podczas sorpcji D<sub>2</sub> w Pd w trzech eksperymentach w temperaturze 75°C. Oporność wznosi się i opada z postępem sorpcji, zawsze "w fazie" z periodycznymi oscylacjami wydzielania ciepła. Determinizm aperiodycznych zmian oporności został potwierdzony za pomocą metody zaproponowanej przez autora [E. Lalik, J. Math. Chem. 52 (2014) 2183.].

Taka ograniczona powtarzalność wydaje się być związana z chaosem i możliwe było potwierdzenie determinizmu aperiodycznych krzywych oporności za pomocą metody matematycznej. Chaotyczne zachowanie obserwowano także w chronoamperometrii. **Rysunek 2A** pokazuje "piki" przewodnictwa (czerwone) współtowarzyszące maksimum oscylacji termokinetycznych (zielone) podczas sorpcji deuteru. Część **B** pokazuje transformaty Fouriera obu krzywych z części **A**. Częstotliwość występowania pików przewodnictwa jest taka sama jak oscylacji wydzielania ciepła.

Ponieważ przepływ prądu w proszku Pd jest funkcją kontaktu międzyziarnowego, możliwe jest, że periodyczne pojawianie się form przejściowych w reakcji wodoru z Pd może mieć miejsce na powierzchni i może być odpowiedzialne za oscylacyjne wydzielanie ciepła podczas sorpcji.



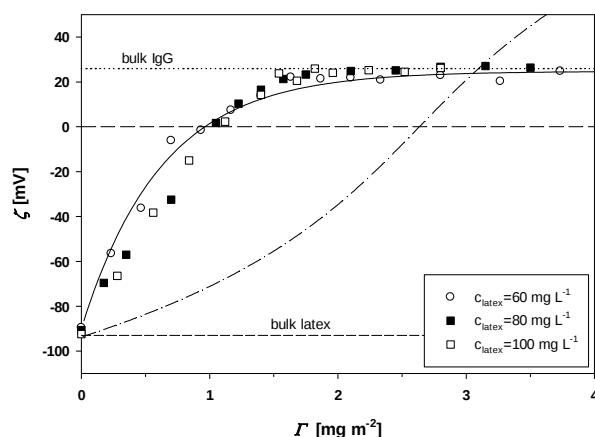
Rysunek 2. (A) Pomiary chronoamperometryczne prądu w proszku Pd (linia czerwona) porównane z oscylacjami termokinetycznymi (linia zielona) podczas sorpcji D<sub>2</sub> w Pd, (B) odpowiednie transformaty Fouriera. Zauważamy pokrywanie się pików obu krzywych przy częstotliwości 0.02 Hz.

## 10. Określenie mechanizmów adsorpcji wybranych białek anizotropowych w kontrolowanych warunkach transportu

Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST4/00559 [2013-2016]

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Adsorpcja immunoglobulin (przeciwciał) na powierzchniach granicznych, w szczególności na powierzchniach nośników koloidalnych jest najważniejszym etapem rozdziału chromatograficznego tych białek oraz testów immunologicznych. Jednakże, pomimo istotnego znaczenia tych procesów oraz przeprowadzania licznych badań brak jest ilościowego opisu kinetyki oraz mechanizmów fizykochemicznych tych procesów. Tak więc, głównym celem przeprowadzonych badań było ilościowe określenie przebiegu adsorpcji immunoglobuliny G (IgG) na powierzchni mikrocząstek polimerycznych, charakteryzujących się ujemnym ładunkiem powierzchniowym przy zastosowaniu metody dynamicznego rozpraszania światła (DLS), LDV oraz obrazowania przy pomocy mikroskopii sił atomowych (AFM). W pierwszej kolejności wyznaczono zależność ruchliwości elektroforetycznej mikrocząstek polimerycznych od stężenia IgG w roztworze dla różnych sił jonowych oraz pH 3.5. Wskutek adsorpcji cząsteczek IgG ruchliwość elektroforetyczna wzrasta raptownie, co przedstawiono na Rysunku 1. Efekt ten interpretowano w sposób ilościowy przy pomocy rozwiniętego w naszej grupie trójwymiarowego modelu elektrokinetycznego (linia ciągła na Rysunku 1). Wykazano równocześnie, że powszechnie stosowany model Gouya-Chapmana jest nieadekwatny do opisu zjawisk adsorpcji IgG, ze względu na nieuwzględnienie czynnika geometrycznych i kształtu cząsteczki białka. Ponadto wyznaczono przy pomocy metody ubytku stężenia połączonej z metodą AFM, maksymalne pokrycia cząsteczek białek w zależności od siły jonowej, co nie było dotychczas badane w literaturze. Określono również stabilność wytworzonych w ten sposób monowarstw IgG oraz ich charakterystyki kwasowo-zasadowe (punkt izoelektryczny) dla szerokiego zakresu pH. Oprócz istotnego znaczenia poznawczego, uzyskane wyniki mają znaczenie praktyczne wskazując, że metoda adsorpcji na powierzchni nośników polimerycznych umożliwia dokonanie pełnej charakterystyki fizykochemicznej cząsteczek białka dla minimalnych (rzędu mikrograma) jego ilości.



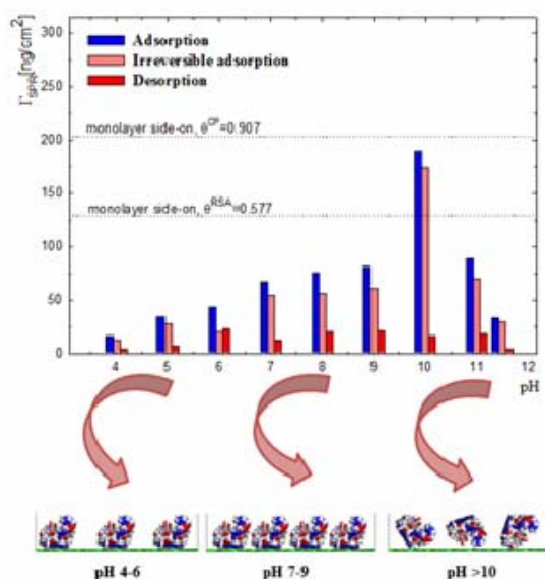
Rysunek 1. Zależność potencjału zeta mikrocząstek polimerycznych  $\zeta$  od nominalnego pokrycia IgG,  $\Gamma$  [mg m<sup>-2</sup>]. Punkty przedstawiają dane doświadczalne uzyskane dla pH 3,5 oraz stężenia NaCl równego 0,01 M. Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne obliczone z modelu 3D rozwiniętego w pracy, a linia kreskowano-kropkowa przedstawia wynik teoretyczne obliczone z modelu Gouya - Chapmana.

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

Projekt badawczy "Opus" NCN ST5/ 00767 [2013-2016]

(kierownik projektu: dr hab. Barbara Jachimska)

Lizozym (LSZ) jest szeroko stosowany jako modelowe białko do badania adsorpcję na powierzchni ciał stałych. W naszych badaniach zastosowaliśmy wieloparametrowy powierzchniowy rezonans plazmonów (MP-SPR), pomiar kątów zwilżania oraz potencjał zeta do analizy procesu adsorpcji LSZ na powierzchni krzemu. Do symulacji użyto pełno atomistyczną Dynamikę molekularną (MD). Symulacje przedstawiają szczegółowy opis mechanizmu adsorpcji i wskazują, że w pH 7 główną siłą napędową adsorpcji jest oddziaływanie elektrostatyczne, uzupełnione poprzez działanie słabszych sił hydrofobowych. Ponadto ujawniają preferowaną orientację zaadsorbowanego białka i pokazują, że jego struktura jest tylko nieznacznie zmieniona na styku z powierzchnią. Daje to podstawę do interpretacji wyników eksperymentalnych, które potwierdzają tworzenie na powierzchni adsorpcyjnej upakowanej monowarstwy dla pH 10, gdy powierzchnia ma duży ujemny potencjał zeta a LSZ jest naładowane dodatnio. Przy wyższym pH, ilość zaadsorbowanego białka jest znacznie mniejsza. Im niższe pH, tym mniejszy potencjał zeta powierzchni adsorpcyjnej, co prowadzi do obniżenia efektywności adsorpcji LSZ. Pomiary SPR zostały uzupełnione przez pomiary kątów zwilżania, na podstawie których skorelowano hydrofobowość powierzchni z pokrycie powierzchniowym białka. Symulacje MD podają, które reszty hydrofobowe wystawione są do roztworu w czasie procesu adsorpcji LSZ oraz obrazują końcową strukturę warstwy białka na powierzchni adsorpcyjnej.



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

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

(kierownik projektu: dr Aleksandra Pacuła)

Przygotowano kompozyty zawierające domieszkowane azotem materiały węglowe o grafitopodobnej budowie, różnej morfologii ziaren i tym samym zróżnicowanej porowatości. Synteza próbek polegała na ogrzewaniu magnezowo-żelazowo-glinowych (Mg-Fe-Al) lub magnezowo-manganowo-glinowych (Mg-Mn-Al) podwójnych wodorotlenków w temperaturze 600 lub 700°C przez 30 min. (w przypadku Mg-Fe-Al) lub 180 min. (w przypadku Mg-Mn-Al) w przepływie argonu nasyconego parami acetonitrylu ( $\text{CH}_3\text{CN}$ ) - źródło atomów węgla i azotu. Do syntezy wykorzystano podwójne wodorotlenki o różnej zawartości jonów metali przejściowych (Fe lub Mn). Dla porównania przygotowano także kompozyty z udziałem magnezowo-glinowego (Mg-Al) podwójnego wodorotlenku niezawierającego jonów metali przejściowych. Wstępnie otrzymane kompozyty były traktowane kwasem ( $\text{HCl}:\text{H}_2\text{O}$  2:1) w celu usunięcia nieorganicznych związków typu tlenów metali (Mg, Al, Fe lub Mn) i przeznaczone dla dalszych badań.

Właściwości fizykochemiczne preparatów scharakteryzowano za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD) w celu określenia ich składu fazowego i struktury; analizy elementarnej w celu oszacowania zawartości pierwiastków (C, N, H); spektroskopii fotoelektronów (XPS) w celu określenia powierzchniowego stężenia pierwiastków (C, N, O, Mg, Fe, Mn, Al, Cl) i ich stopnia utlenienia; mikroskopii elektronowej (SEM i EDS) w celu poznania morfologii materiałów węglowych oraz detekcji cząstek metalicznych (Mn, Fe) i określenia ich wielkości i lokalizacji oraz dokonania analizy składu powierzchniowego (C, O, Mg, Mn, Fe, Al, Cl); niskotemperaturowej sorpcji azotu w celu określenia powierzchni właściwej i porowatości.

Aktywność elektrokatalityczną preparatów w reakcji redukcji tlenu sprawdzono za pomocą woltamperometrii cyklicznej. Eksperymenty przeprowadzono w temp. pokojowej ( $25 \pm 1^\circ\text{C}$ ) stosując jako elektrolit podstawowy wodny roztwór wodorotlenku potasu (0.1 M KOH) lub kwasu siarkowego (VI) (0.5 M  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ). Pomiary dokonano w układzie trójelektrodowym, który stanowiły: stacjonarna elektroda z węgla szklistego, którego powierzchnia pokryta była badaną próbką (elektroda robocza), drut platynowy (przeciwelektroda) i elektroda chlorosrebrowa (elektroda odniesienia).

Materiały węglowe otrzymane z udziałem Mg-Fe-Al LDHs w niższej temp. (600°C) charakteryzowały się płytkową morfologią natomiast te otrzymane w wyższej temp. (700°C) zawierały nanorurki węglowe, które powstały w wyniku obecności nanocząstek żelaza. Składnik węglowy w próbkach otrzymanych w niższej temp. (600°C) był w większym stopniu domieszkowany azotem (ok. 5-10 % wag.) niż ten w próbkach otrzymanych w wyższej temp. (700°C) (ok. 2-3 % wag.). Kompozyty były aktywne w reakcji redukcji tlenu zarówno w roztworze alkalicznym jak i w roztworze kwaśnym.

Materiały węglowe otrzymane z udziałem Mg-Mn-Al LDHs charakteryzowały się płytkową morfologią ziaren i stosunkowo dużą zawartością wbudowanego azotu (ok. 7-8 % wag.) Kompozyty były słabo aktywne w reakcji redukcji tlenu w roztworze alkalicznym i praktycznie nieaktywne w reakcji redukcji tlenu w roztworze kwaśnym. Powierzchnia właściwa próbek otrzymanych w 600°C ( $1185$  i  $1329 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$  dla C-Mg<sub>2.6</sub>Mn<sub>0.4</sub>Al-600 i C-Mg<sub>2.8</sub>Mn<sub>0.2</sub>Al-600) była wyższa niż powierzchnia właściwa próbek otrzymanych w 700°C ( $929$  i  $936 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$  dla C-Mg<sub>2.6</sub>Mn<sub>0.4</sub>Al-700 i C-Mg<sub>2.8</sub>Mn<sub>0.2</sub>Al-700). Ze względu na dużą powierzchnię właściwą próbki te zostaną wykorzystane jako nośniki nanocząstek palladu (Pd) i będą dalej badane jako elektrokatalizatory w reakcji redukcji tlenu.

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

Badania koncentrowały się na opracowaniu metody otrzymywania mikroemulsji zawierających nanocząstki hydrotalkitu manganowo-glinowego, jako prekursora tlenkowej fazy aktywnej. W charakterze warstwowego krzemianu wykorzystano syntetyczny smektyt Laponit, który stosowano zarówno jako formę sodową (Na-L), jak i pochodną organiczną otrzymaną przez wymianę jonów  $\text{Na}^+$  na kationy  $(\text{C}_{16}\text{H}_{33})\text{N}(\text{CH}_3)_3$  (CTA-L). Układy hydrotalkit/Laponit z Na-L otrzymywano w środowisku wodnym, a z CTA-L w izopropanolu, po czym poddawano je kalcynacji w wysokiej temperaturze ( $600^\circ\text{C}$ ). Katalizatory oznaczono  $\text{MnAl}(\text{rm})/\text{Na-L}(\text{x})\text{-600}$  oraz  $\text{MnAl}(\text{rm})/\text{CTA-L}(\text{x})\text{-600}$ , odpowiednio dla syntezy w wodzie i w izopropanolu, gdzie x określa stosunek atomowy Mn/Si. Jako katalizatory referencyjne wykorzystano układy ze składową hydrotalkitową otrzymaną w sposób konwencjonalny. Otrzymane materiały scharakteryzowano przy pomocy XRF, XRD, XPS, SEM, FTIR,  $\text{H}_2$  TPR, i sorpcji  $\text{N}_2$  w  $-196^\circ\text{C}$  i przetestowano w reakcji katalitycznego spalania toluenu.

Wyniki testów katalitycznych wykazały, że wszystkie badane katalizatory są aktywne w spalaniu toluenu, przy czym układy zawierające fazę tlenkową otrzymaną metodą odwróconej miceli przewyższają aktywnością odpowiednie katalizatory referencyjne. Ponadto, kompozyty otrzymane w środowisku organicznym są bardziej aktywne niż ich odpowiedniki otrzymane w środowisku wodnym, co wynika z lepszej dyspersji odwróconych miceli w materiałach zsyntetyzowanych na osnowie organosmektytu.

Uzyskane wyniki posłużą do zaprojektowania kolejnych układów katalitycznych zawierających nanocząstki aktywnej katalitycznie fazy tlenkowej interkalowanej pomiędzy pakietami smektytu.

## **14. 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: dr hab. Tomasz Borowski prof IKiFP)

W projekcie tym obiektami badawczymi są nowo zidentyfikowanych dioksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu katalizujące złożone reakcje i 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).

W ramach tego projektu wykorzystane zostaną metody krystalografii makromolekularnej do strukturalnej charakterystyki wybranych enzymów, przeprowadzone będą badania metodami chemii kwantowej celem wglądu w mechanizmy reakcji, a metodami biochemicznymi i biofizycznymi próba zidentyfikowania pozycji w łańcuchu białkowym kluczowe dla specyficzności reakcji i/lub selektywności substratowej.

Realizacja projektu rozpoczęła się we wrześniu 2015. Opracowano metodę otrzymywania enzymu syntetyzującego etylen, potwierdzono jego aktywność katalityczną oraz rozpoczęto próby krystalizacji białka. Opracowano fluorescencyjny test aktywności enzymatycznej dla dowolnej dioksygenazy zależnej od 2-oksoglutaranu.

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



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

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

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

Celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych metody funkcjonalizacji cienkich filmów polimerowych wytwarzanych metodą "warstwa po warstwie" (Layer-by-Layer) w celu otrzymania powłok o określonych właściwościach. Funkcjonalizacja filmów polimerowych jest przeprowadzona poprzez inkorporacje w ich strukturę nano-objektów, nanocząstek metalicznych, tlenkowych, tlenku grafenu oraz jego zredukowanej formy. Alternatywną metodą funkcjonalizacji jest powierzchniowa modyfikacja takich filmów. Filmy takie będą mogły znaleźć zastosowanie jako powłoki o różnych właściwościach i funkcjach.

Pierwszym zadaniem w omawianym okresie sprawozdawczym była kontynuacja oraz optymalizacja pomiarów przewodnictwa powierzchniowego multiwarstw tworzonych metodą "warstwa po warstwie" (LbL) z tlenkiem grafenu:

- polielektrolit (PE) / tlenek grafenu ( $\text{GO}^-$ ),
- modyfikowany tlenek grafenu ( $\text{GO}^+$ ) / polielektrolit (PE),
- modyfikowany tlenek grafenu ( $\text{GO}^+$ ) / tlenek grafenu ( $\text{GO}^-$ ).

Do przeprowadzenia badań wykorzystano czteroelektrodową metodę pomiaru przewodnictwa powierzchniowego. Substraty stanowiły kwarc oraz folia poliimidowa, które nie mają właściwości przewodzących. Filmy zawierające tlenek grafenu przed pomiarami przewodnictwa poddane zostały procesowi redukcji termicznej, która została przeprowadzona *in-situ* w celu otrzymania grafenu w strukturze filmu. Redukcję termiczną prowadzono w różnych temperaturach 150, 180 oraz 250°C. Z przeprowadzonych badań przewodnictwa powierzchniowego wynika, że dla filmów ( $\text{PE/rGO}^-$ ) maleje opór właściwy wraz ze wzrastającą liczbą biwarstw, czyli wzrasta przewodnictwo powierzchniowe. Filmy zbudowane z ( $\text{rGO}^+/\text{PE}$ ) mają znacznie mniejsze przewodnictwo w porównaniu do filmów ( $\text{PE/rGO}^-$ ). Z kolei filmy składające się z ( $\text{rGO}^+/\text{rGO}^-$ ) wykazują nieznacznie większe przewodnictwo w stosunku do filmów ( $\text{PE/rGO}^-$ ) oraz ( $\text{rGO}^+/\text{PE}$ ). Natomiast filmy ( $\text{PE/GO}^-$ ) nie wykazują właściwości przewodzących. Wpływ temperatury jest widoczny dla początkowych ilości warstw (im wyższa temperatura, tym większa redukcja GO), powyżej 5 biwarstw nie ma znaczących różnic zależności temperatury od przewodnictwa powierzchniowego badanych multiwarstw.

Drugim zadaniem było opracowanie metody modyfikacji powłok polielektrolitowych w celu eliminacji oddziaływań niespecyficznych. Cel ten został osiągnięty poprzez immobilizację łańcuchów PEG (glikolu polietylenowego) na powierzchni filmu. Do tego celu wykorzystano odpowiednie kopolimery (polielektrolity z wszczepionymi łańcuchami PEG; PGA-g-PEG oraz PLL-g-PEG) syntezowane w naszym laboratorium. Aby utworzyć warstwę PEG na powierzchni filmu zostały one pokryte pegylovanym polielektrolitem. Procedura tworzenia zewnętrznej pegylowanej warstwy jest analogiczna do tworzenia warstw polielektrolitów. Wykorzystano kopolimery o różnym długości łańcucha PEG (MW 1000, 2000, 5000) oraz różnym stopniu wszczepienia (~10%, ~30%, ~50%). Pozwoliło to uzyskać filmy z różną długością i gęstością łańcuchów PEG na powierzchni. Przeprowadzono badania weryfikujące wpływ pegylovanых filmów na adsorpcję białek HSA i fibrynogen z wykorzystaniem mikrowagi kwarcowej (QCM). Z dotychczas przeprowadzonych badań wynika, że najbardziej odpowiednimi łańcuchami PEG do eliminacji oddziaływań niespecyficznych jest łańcuch o długości MW 5000 i stopniu wszczepienia ~ 30% oraz ~50%.

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

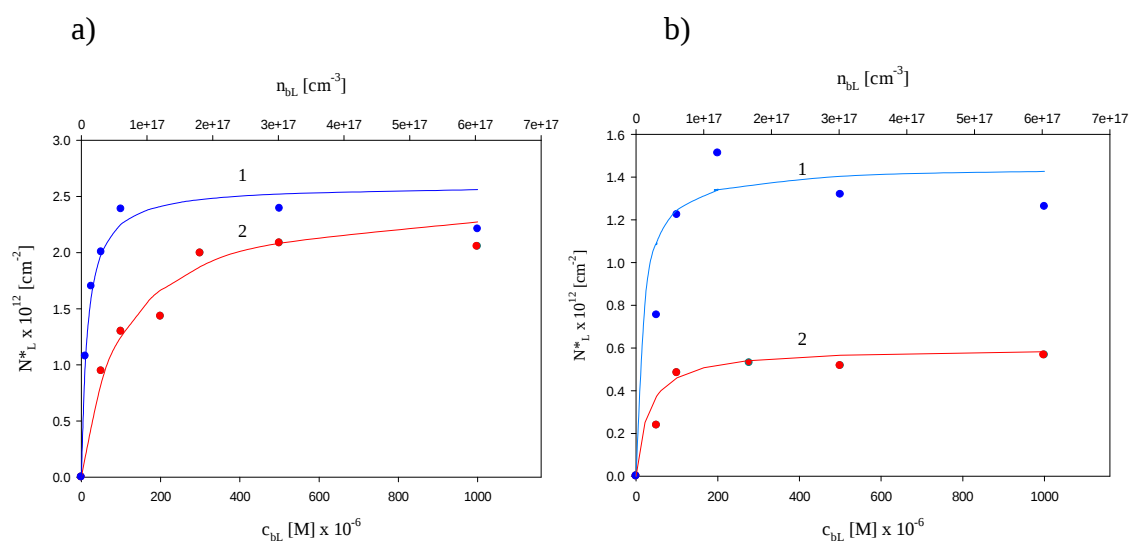
Projekt badawczy "Preludium" NCN 2012/07/N/ST5/02219 [2013-2015]

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

Celem zadań badawczych w 2015 roku było określenie mechanizmu wiązania oraz wyznaczenie stałych adsorpcji dla ligandów niskocząsteczkowych takich jak: jony miedzi i cynku oraz cząsteczek kwasu taninowego na monowarstwach albumin (monomeru HSA i dimeru dHSA) na powierzchni miki. Pomiaru te prowadzono przy użyciu czułych metod elektrokinetycznych, potencjału przepływu w warunkach *in situ*. Badania wiązania ligandów zostały przeprowadzone dla monowarstw białek o maksymalnym pokryciu. W oparciu o uzyskane wyniki wyznaczono następujące parametry: równowagowe stałe adsorpcji  $K_a$  [cm], maksymalne stężenie powierzchniowe liganda  $N_{L\infty}^*$  [cm<sup>-2</sup>] oraz energię wiązania  $\Delta\phi_m$  [kT]. Wykazano zwiększoną adsorpcję jonów miedzi na monowarstwach białka w porównaniu do jonów cynku. Wskazano na słabsze zdolności wiązania jonów przez syntetyczny dimer w porównaniu do monomeru (Rysunek.1).

W przypadku kwasu taninowego wykazano preferencyjne wiązanie do dimeru albuminy. Ze względu na to, że cząsteczki kwasu taninowego wiążą się w tych samych rejonach białka, co większość preparatów leczniczych, wyciągnięto wniosek, że dHSA wykazuje lepsze własności wiązania ligandów w porównaniu do monomeru.

Wyniki te potwierdzają efektywność metody pomiaru potencjału przepływu w badaniach wiązania niskocząsteczkowych ligandów jonowych przez monowarstwy białek. Opracowana metodyka badawcza może stać się kolejną z bezpośrednich metod analizy oddziaływań w układzie białko-ligand.



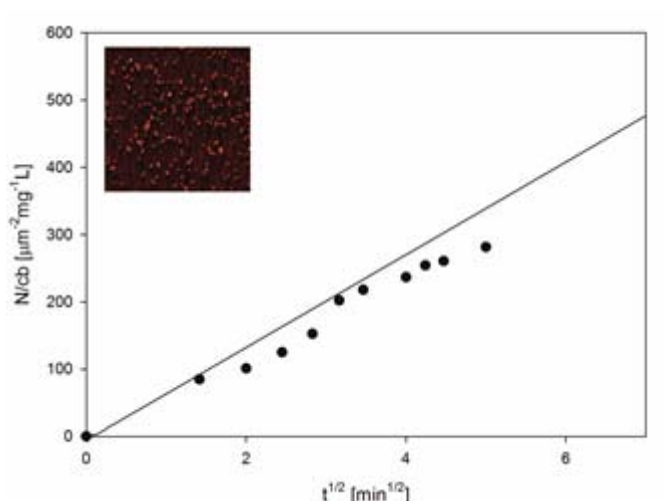
Rysunek 1. Izoterma wiązania jonów: 1)  $\text{Cu}^{2+}$  (●) i 2)  $\text{Zn}^{2+}$  (●) na powierzchni monowarstwy: a) rHSA oraz b) dHSA, przedstawiona jako zależność stężenia powierzchniowego ligandów (jonów)  $N_L^*$  [cm<sup>-2</sup>] od stężenia jonów w objętości  $c_{bL}$  [M] (oś dolna) i  $n_{bL}$  [cm<sup>-3</sup>] (oś górna). Linie ciągłe przedstawiają izotermę Langmuira. Wiązanie prowadzono dla siły jonowej  $10^{-2}$  M, pH 5,7.

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

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2013/09/N/ST4/00320 [2013-2015]

(mgr Paulina Żeliszewska, promotor: prof. Zbigniew Adamczyk)

W ramach planowanych prac wykonano znakowanie fluorescencyjne cząsteczek fibrynogenu ludzkiego przy użyciu barwnika fluorescencyjnego. Następnie oczyszczono wyznakowane białko z nadmiaru barwnika i przy pomocy spektrofotometru wyznaczono jego stężenie. Ponadto wykonano charakterystykę fibrynogenu, która obejmowała wyznaczenie średnicy hydrodynamicznej znakowanego białka, pomiar intensywności fluorescencji od stężenia i siły jonowej, oraz sprawdzenie stabilności w czasie. Kolejnym etapem badań było wyznaczenie kinetyki adsorpcji fibrynogenu na powierzchni miki przy użyciu mikroskopu AFM. Na Rysunku 1 przedstawione zostały wyniki tych badań uzyskane dla siły jonowej  $10^{-2}$  M NaCl oraz pH 3.5. Punkty przedstawiają wyniki doświadczalne, natomiast linia prosta wyniki obliczeń teoretycznych, wykonanych przy użyciu modelu RSA.



Rysunek 1. Zależność znormalizowanego stężenia powierzchniowego fibrynogenu znakowanego fluorescencyjnie od pierwiastka z czasu adsorpcji.

Następnie zbadano proces adsorpcji białka na powierzchni mikrosfer polistyrenowych, przez monitorowanie zmian ich ruchliwości elektroforetycznej (potencjału zeta) wraz ze wzrastającym stężeniem fibrynogenu. Wszystkie pomiary przeprowadzone zostały dla trzech sił jonowych  $10^{-3}$ ,  $10^{-2}$ , 0.15 M NaCl oraz pH 3.5 i 7.4. Ponadto sprawdzono zależność intensywności fluorescencji od stopnia pokrycia mikrosfer polistyrenowych cząsteczkami fibrynogenu. Uzyskane wyniki mają istotne znaczenie umożliwiając rozwinięcie efektywnej metodyki określania mechanizmów adsorpcji białek globularnych na powierzchniach granicznych.

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

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

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

Celem badań kwantowo-chemicznych zaplanowanych w grancie na rok 2015 było określenie przepływu ładunku pomiędzy centrum Co(II) w zeolicie (modyfikowanym przez donorowe cząsteczki amoniaku związane z kobaltem) a ligandem NO.

Wykonano obliczenia periodyczne dla chabazytu i lokalizacji kationu  $\text{Co}^{2+}$  w pierścieniu sześć- lub ośmioczłonowym (optymalizacja geometrii dla struktury periodycznej, symulacje dynamiki molekularnej Borna-Oppenheimera). Uzyskano weryfikację badań klasterowych – potwierdzono zwiększoną aktywację NO w wyniku ko-adsorpcji, stwierdzono poprawność stosowanych modeli klasterowych w obliczeniach DFT oraz skorelowanej funkcji falowej. Przeprowadzono szczegółową analizę charakteru wielowyznacznikowej funkcji falowej w języku struktur rezonansowych (obrazującym różne formy z przeniesieniem ładunku kompleksów zawierających rdzeń  $\{\text{Co(II)-NO}\}^8$ ).

Wyrażenie skorelowanej funkcji falowej za pomocą aktywnych orbitali zlokalizowanych pozwoliło określić udział struktur rezonansowych  $\text{Co}^{\text{II}}\text{NO}^0$ ,  $\text{Co}^{\text{III}}\text{NO}^-$ ,  $\text{Co}^{\text{I}}\text{NO}^+$ , a tym samym wyjaśnić silną aktywację dla układu  $[(\text{T1})\text{Co}(\text{NH}_3)_3]^+-\text{NO}$ . Zaobserwowane w stanie singletowym osłabienie aktywacji NO ze wzrostem liczby koordynujących ligandów  $\text{NH}_3$  (z  $\Delta\nu = -226 \text{ cm}^{-1}$  do  $\Delta\nu = -166 \text{ cm}^{-1}$  przy przejściu od trzech do pięciu cząsteczek  $\text{NH}_3$ ) należy tłumaczyć słabszą donacją zwrotną na orbital antywiążący NO, wynikającą z zastąpienia dwóch sieciowych atomów tlenu dwoma cząsteczkami amoniaku.

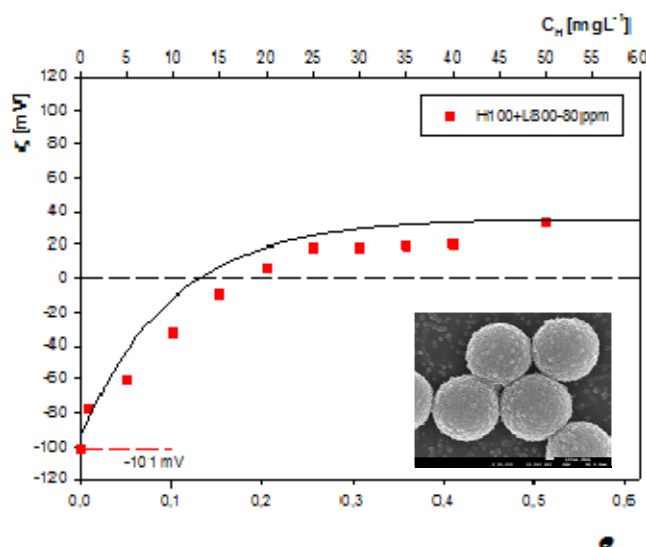
Ważnym wynikiem teoretycznym jest wykazanie roli polaryzacji spinowej w procesach transferu ładunku dla układów adsorpcyjnych kobalt – tlenek azotu przy współobecności amoniaku, co może mieć ogromne znaczenie dla mechanizmu reakcji deNOx na centrach metali przejściowych modyfikowanych przez sorpcję ligandów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

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

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

Określenie mechanizmów adsorpcji nanocząstek ma znaczenie dla optymalizacji przebiegu wielu praktycznych procesów, np. wytwarzania systemów mikrokapsularnych opartych na układach koloidalnych. Mono- i wielowarstwowe filmy tworzone w nośnikach koloidalnych są także ważnym czynnikiem do produkcji katalizatorów. Warstewki hematytu (stabilnego tlenku żelaza) na przykład są stosowane jako katalizatory w procesach Habera, a monowarstwy białek (enzymów) na nośnikach koloidalnych są powszechnie używane w procesach katalizy enzymatycznej oraz w testach immunologicznych.

Tak więc, w ramach planowanych prac przeprowadzono pomiary kinetyki adsorpcji nanocząstek hematytu na powierzchniach płaskich oraz na powierzchni nośników koloidalnych-mikrocząstek polimerycznych przy użyciu metod elektrokinetycznych, metody ubytku stężeni oraz metod mikroskopii SEM i AFM. Wyznaczono w sposób systematyczny wpływ siły jonowej oraz wielkości nanocząstek na mechanizmy ich adsorpcji, w szczególności pokrycia maksymalne. Przykładowe wyniki uzyskane dla siły jonowej  $10^{-2}$  M oraz cząstek hematytu o rozmiarach 100 nm pokazano na Rysunku 1. Jak można zauważyć, wyniki doświadczalne są dobrze opisywane rozwiniętym w naszej grupie trójwymiarowym modelem elektrokinetycznym, uwzględniającym przestrzenny rozkład ładunku elektrycznego. Pomiary te wykazały też, że wzrost siły jonowej powoduje znaczący wzrost pokrycia maksymalnego nanocząstek, co interpretowano jako efekt malejącego zasięgu odpychających oddziaływań elektrostatycznych między cząstkami. Tym samym, przez zwiększeni siły jonowej można uzyskać monowarstwy nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych o wysokiej gęstości, co ma duże znaczenie praktyczne.



Rysunek 1. Zależność potencjału zeta mikrocząstek polimerycznych L800 od pokrycia nanocząstkami hematytu dla pH 5,5 i siły jonowej  $10^{-2}$  M (punkty). Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne obliczone z modelu elektrokinetycznego 3D. Zdjęcie SEM przedstawia monowarstwę hematytu na mikrocząstkach polimerycznych.



## **PROJEKTY BADAWCZE NCN "HARMONIA"**



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

Projekt badawczy "Harmonia" NCN 2012/06/M/ST4/00032 [2013-2015]

współpraca polsko-austriacko-szwajcarska

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Celem projektu jest poszukiwanie korelacji pomiędzy szeroko pojętą strukturą i morfologią, a przebiegiem i kinetyką powierzchniowych reakcji dla modelowych katalizatorów, którymi są metaliczne i tlenkowe nanostruktury otrzymywane na podłożach monokrystalicznych i polikrystalicznych. Podstawowymi metodami badawczymi w projekcie są wysokorozdzielcze mikroskopy powierzchni: skaningowa mikroskopia tunelowa (STM) oraz mikroskop na elektronach niskoenergetycznych (low energy electron microscopy – LEEM), który wykorzystywany jest w projekcie również jako mikroskop fotoemisyjny (photoemission electron microscopy – PEEM) z wykorzystaniem zarówno źródeł laboratoryjnych, jak i promieniowania synchrotronowego (X-PEEM).

Stosowana metodyka badawcza umożliwia obrazowanie szeroko pojętej struktury powierzchniowej (chemicznej, topograficznej, elektronowej) w skali mikrometrowej i nanometrowej, a także monitorowanie zmian powierzchni w wyniku zachodzenia reakcji powierzchniowych. W obecnej chwili projekt realizowany jest głównie we współpracy ze Swiss Light Source (SLS) w Szwajcarii.

Jednym z podstawowych celów w modelowych badaniach katalitycznych jest zbliżenie obiektów badań modelowych do rzeczywistych katalizatorów przemysłowych. Istotnym krokiem w realizacji takiego zamierzenia jest rozszerzenie badań modelowych na układy polikrystaliczne. Grupa austriacka jest pionierem badań reakcji katalitycznych na polikrystalicznej platynie z wykorzystaniem mikroskopii fotoemisyjnej (PEEM). W próbkach polikrystalicznych monokrystaliczne ziarna o różnych orientacjach mogą być według grupy austriackiej zidentyfikowane na podstawie różnego kontrastu w mikroskopie PEEM związanego z różną pracą wyjścia. Celem badań prowadzonych w Instytucie Katalizy było bezpośrednie określenie orientacji ziaren polikrystalicznej folii platyny z wykorzystaniem mikroskopii na niskoenergetycznych elektronach (LEEM) i korelacja orientacji krystalitów z kontrastem uzyskiwanym w obrazach PEEM. Ze względu na dużą pracę wyjścia platyny realizacja pomiarów PEEM w warunkach laboratoryjnych wymagała zastosowania odpowiedniego źródła światła. Opracowano metodykę pomiarów PEEM z wykorzystaniem lampy ksenonowej wzbudzanej promieniowaniem laserowym. Pokazano, że opracowana metodyka z wykorzystaniem kwarcowych elementów optycznych pozwala na przesunięcie możliwości obrazowania do powierzchni o pracy wyjścia ok. 5,5 eV, co w zupełności wystarcza na obrazowanie ziaren platyny o orientacjach (001), (110) oraz (111). Za pomocą mikroskopu LEEM określono orientację krystalitów w odpowiednio spreparowanej folii Pt. Folia Pt przygotowywana była wg. recept stosowanych dla próbek monokrystalicznych. Uzyskano czyste powierzchnie polikrystaliczne o rozmiarze krystalitów w zakresie od kilku do kilkuset mikrometrów, przy czym większość ziaren miała powierzchnię z dużą gęstością stopni. Stwierdzono, że w obrazach PEEM ziarna o dużej gęstości stopni dają jednorodny kontrast zależny od wycinalności powierzchni i w związku z tym trudno jest mówić o jednoznacznej korelacji pomiędzy kontrastem w mikroskopie PEEM a orientacją ziarna. Oznacza to, że badania katalityczne z użyciem polikrystalicznych próbek bezwzględnie wymagają mikroskopowej metody dyfrakcyjnej, która pozwala na precyzyjną orientację danego ziarna.

Mikroskop PEEM przeznaczony do pracy w synchrotronie został przeniesiony i zainstalowany w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris. Uzyskano pełną funkcjonalność komory preparacyjnej i komory obrazowania.



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



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

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2012 006372 [2013-2015]  
(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

### Modelowanie molekularne reakcji mutarotacji glukozy: wyniki

W ramach niniejszego projektu przeprowadzono szczegółowe badania teoretyczne, zgodnie z protokołem dynamiki molekularnej w oparciu o potencjały oddziaływań *ab initio* połączone z klasycznymi polami siłowymi (QM/MM). Celem był szczegółowy opis mechanizmu reakcji mutarotacji zachodzącej z udziałem cząsteczki glukozy.

Uzyskane wyniki można streścić następująco:

1. **Identyfikacja roli wody w procesie otwierania pierścienia.** Ustalono dokładny mechanizm, a także liczbę cząsteczek wody biorących udział w reakcji otwierania pierścienia heksopiranoz. Możliwy jest proces z udziałem zarówno jednej jak i dwóch cząsteczek wody jednak dominujący mechanizm jest związany z tą pierwszą możliwością (wykazano to dla przypadku  $\beta$ -glukozy).
2. **Analiza poszczególnych etapów reakcji otwierania pierścienia.** Zgodnie z otrzymanymi wynikami, w początkowych etapach reakcji cząsteczka wody, działając jak zasada Brønsteda, odrywa proton od grupy hydroksylowej przy anomerycznym atomie węgla (C1). Następnie, po serii transferów protonu (lub protonów), następuje protonacja atomu tlenu w pierścieniu węglowodanowym (O5). Proces ten jest kluczowym etapem, który zapoczątkowuje rozrywanie się wiązania C1-O5. Poczynając od etapu protonacji O5, postulowany mechanizm jest podobny to tego opisanego uprzednio dla katalizowanego kwasami Brønsteda procesu mutarotacji  $\beta$ -glukozy. Nie stwierdzono istotnych różnic pomiędzy mechanizmami reakcji dla obu badanych anomerów ( $\alpha$  i  $\beta$  glukoza).
3. **Opis dynamicznych aspektów reakcji otwierania pierścienia.** Wyniki uwzględniają charakterystykę czasową procesu. Najbardziej czasochłonnym etapem procesu jest reorientacja cząsteczek wody biorących udział w reakcji, co jest konieczne w procesie transferu protonów.
4. **Preferencje konformacyjne grupy aldehydowej.** W serii dodatkowych symulacji zbadano wpływ preferencji konformacyjnych acyklicznej postaci cząsteczki glukozy (w formie aldehydowej) na możliwy produkt reakcji zamykania pierścienia (t.j. anomer  $\alpha$  lub  $\beta$ ). Obliczone względne energie swobodne są zgodne z danymi eksperymentalnymi dot. względnych populacji anomerów  $\alpha$  i  $\beta$  w roztworze wodnym dla 8 heksapiranoz. Pozwala to na wniosek, że głównym czynnikiem determinującym produkt reakcji zamykania pierścienia są preferencje konformacyjne grupy aldehydowej.

Podsumowując, osiągnięcia naukowe związane z realizacją projektu skupiają się na szczegółowym opisie procesu otwierania pierścienia glukozy oraz analizie konformacyjnej acyklicznej cząsteczki glukozy. W porównaniu do już istniejących wyników, niniejsze badania skupiają się na ścieżce reakcji prowadzącej do rozerwania pierścienia glukozy; wybrana metoda próbkowania pozwala na analizę rzeczywistych trajektorii, a co za tym idzie, otrzymane wyniki nie są uzależnione od wybranej *a priori* współrzędnej reakcji.

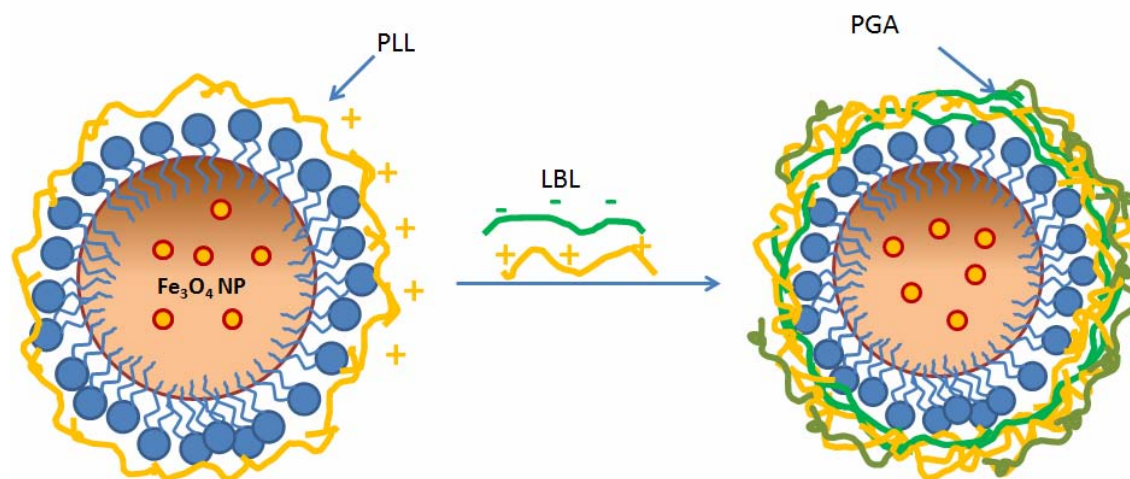
## 2. Magnetyczne systemy dostarczania leków z możliwością sterowanego uwalniania czynnika aktywnego

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

(kierownik projektu: dr Krzysztof Szczepanowicz)

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

W 2015 roku skupiliśmy się na zadaniu projektu dotyczącym wbudowania wybranych nanocząstek magnetycznych do olejowego rdzenia nanokapsułki. Nanokapsułki otrzymywano metodą opracowaną w naszym instytucie tj. bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej zawierającej nanocząstkę magnetytu w powłokach polielektrolitowych tzw. metodą warstwa po warstwie. Multiwarstwowe powłoki tworząco metodą sekwencyjnej adsorpcji polielektrolitów, tzw metodą warstwa po warstwie przy użyciu biokompatybilnych polielektrolitów takich jak poli-L-Lizyna oraz kwas poli-Glutaminowy. Otrzymano nanokapsułki o średnim rozmiarze 100 nm. Na Rysunku 1 przedstawiono schemat preparatyki otrzymywanych magnetycznych nanokapsułek.



Rysunek 1. Schemat tworzenia nanokapsułek zawierających cząstki magnetyczne w rdzeniu struktury

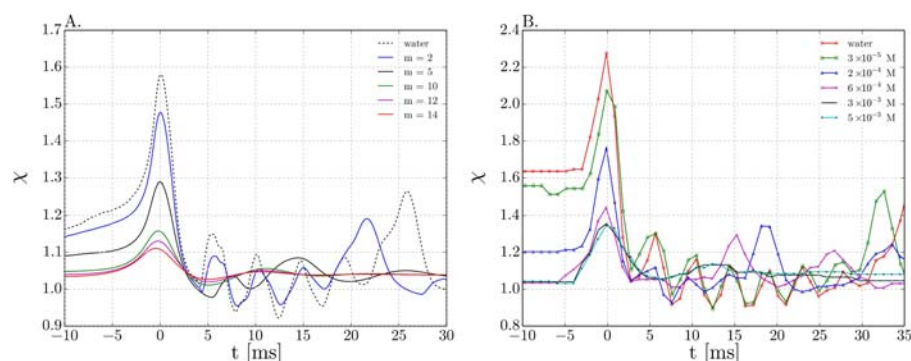
### 3. Teoretyczny opis wpływu zmian ruchliwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe na przebieg kolizji i kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2014 053973 [2013-2015

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem niniejszego projektu jest wykonanie obliczeń numerycznych z wykorzystaniem Obliczeniowej Mechaniki Płynów (ang. Computational Fluid Dynamics – CFD) prowadzących do opracowania i walidacji modelu, który będzie umożliwiał określenie wpływu ruchliwości oddziałujących powierzchni międzyfazowych ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe na kinetykę zderzeń pęcherzyka gazowego z powierzchnią hydrofobowego ciała stałego. Jest to ważny problem, ponieważ zderzenie pęcherzyka gazu z hydrofobową powierzchnią stałą stanowi ważny etap wielu ważnych procesów technologicznych np. flotacji pianowej.

W okresie sprawozdawczym opracowano geometrię domeny obliczeniowej, którą była kolumna cieczy opisana cylindrycznym układem współrzędnych, zawierająca pęcherzyk powietrza o średnicy 0.74 mm. Obliczono parametry swobodnego wznoszenia się pęcherzyka, tj. jego prędkość, deformacje kształtów oraz przyspieszenie początkowe w zależności od wielkości domeny obliczeniowej. Otrzymane dane numeryczne porównano z wynikami odpowiednich eksperymentów w celu oceny zbieżności obliczeń oraz ich poprawności. Ponadto, obliczono poszczególne komponenty energii całkowitej związanej z ruchem pęcherzyka w cieczy oraz zmiany tych komponentów w trakcie zderzeń i odbić od powierzchni międzyfazowej (zmiany energii potencjalnej i powierzchniowej, kinetycznej oraz lepkościowego rozproszenia energii). W celu zmiany właściwości fizykochemicznych powierzchni ciecz/gaz, opracowano model, oparty na zmianach lepkości powierzchni międzyfazowej (powierzchnia pęcherzyka), imitujący różny stopień pokrycia tej powierzchni cząstkami substancji powierzchniowo-aktywnej i różny stopień immobilizacji powierzchni ciecz/gaz. Na podstawie obliczeń numerycznych określono wartości lepkości powierzchniowej, powodujące zmiany prędkości poruszania się pęcherzyka w cieczy porównywalne z obserwowanymi w eksperymencie (ze 100% prędkości w czystej wodzie do około 45% dla powierzchni unieruchomionej całkowicie). Obliczono także wpływ unieruchomienia powierzchni pęcherzyka na dynamikę jego odbić od powierzchni gładkiego hydrofobowego ciała stałego i kinetykę utworzenia kontaktu trójfazowego. Wyniki obliczeń numerycznych zgadzały się bardzo dobrze z danymi eksperymentalnymi. W obu przypadkach zaobserwowano zmniejszenie prędkości uderzenia, amplitudy kolejnych odbić oraz deformacji kształtu ( $\chi$ ) podczas kolejnych zderzeń (Rysunek 1) na skutek wzrostu współczynnika oporu, a więc szybkości rozpraszania energii kinetycznej związanej z ruchem pęcherzyka.



Rysunek 1. Zmiany deformacji pęcherzyka o różnym stopniu unieruchomienia powierzchni podczas jego kolejnych zderzeń z gładką powierzchnią hydrofobowego ciała stałego: (A) obliczenia numeryczne, (B) dane eksperymentalne



## **PROJEKTY STRATEGICZNE NCBiR**



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

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

(kierownik projektu: prof. Alicja Drelinkiewicz)

Celem badań jest określenie czynników wpływających na aktywność nośnikowych katalizatorów metalicznych w reakcji rekombinacji wodoru i tlenu z utworzeniem wody. Ta silnie egzotermiczna reakcja ( $\text{H}_2 + 0.5 \text{O}_2 = \text{H}_2\text{O} + 240 \text{ kJ}$ ) stanowi problem z punktu widzenia bezpieczeństwa reaktorów nuklearnych (zagrożenie eksplozją), gdyż przebiega stale w wyniku permanentnego tworzenia wodoru. W reaktorach nuklearnych stosowane są pasywne katalityczne rekombinatory (passive autocatalytic recombiners, PAR). Zawierają one platynę osadzoną na podłożu z tlenku glinu („wash-coat”-type). Katalizator powinien być aktywny w temperaturze pokojowej jak i powinien być odporny na obecność wody, ze względu na wysoki poziom wilgoci w obudowie reaktora nuklearnego.

Realizowane prace obejmowały badanie katalizatorów bimetalicznych Pd-Au na podłożach tlenkowych  $\text{Al}_2\text{O}_3$  i  $\text{SiO}_2$  w reakcji rekombinacji wodoru i tlenu. Przeprowadzono syntezę szeregu katalizatorów o zmiennym stosunku Pd/Au metodą „water-in-oil” mikroemulsji odwróconej. Metoda ta umożliwia uzyskanie katalizatorów o z góry zadanej wielkości nanocząstek metalu, jak i kontrolowanym stężeniu powierzchniowym metalu.

Wykonane badania koncentrowały się na określeniu roli rodzaju nośnika ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$ ) oraz stosunku Pd/Au na aktywność i stabilność pracy katalizatorów w mieszaninie reakcyjnej zawierającej wilgoć.

Uzyskane wyniki dotyczą następujących zagadnień

- a) synteza katalizatorów z zastosowaniem różnych nośników
- b) charakteryzacja właściwości fizykochemicznych katalizatorów; teksturalnych (powierzchnia właściwa, porowatość; BET) i fazy metalicznej (wielkość nanocząstek metali, ich rozkład w matrycy nośnika, XRD, XPS, SEM, TEM, HRTEM)
- c) pomiary aktywności katalitycznej w laboratoryjnym reaktorze przepływowym z zastosowaniem mieszaniny reakcyjnej 0.5 %  $\text{H}_2$  w powietrzu, wysycanej parą wodną w temp. 25°C
- d) określenie metodą mikrokalymetrii przepływowej (Microscal) efektu termicznego reakcji rekombinacji wodoru i tlenu oraz stabilności katalizatorów
- e) obliczenia metodą DFT oddziaływań elektronowych w układach cząsteczka  $\text{H}_2\text{O}$  – klaster metalu  $\text{M}_{2-26}$  (M = Pd, Au, Pd-Au)

Pomiary aktywności/stabilności metodą mikrokalymetrii przepływowej pokazały, że zarówno rodzaj nośnika jak i stosunek Pd/Au wpływały na dezaktywację katalizatorów spowodowaną obecnością wody - produktu reakcji. Największej dezaktywacji ulegały katalizatory zawierające  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Zawartość Au (Pd/Au) warunkowała ilość wydzielonego ciepła jak i stabilność katalizatorów. Najlepsze wyniki uzyskano dla katalizatorów Pd-Au/ $\text{SiO}_2$  zawierających tylko 10 mol % Au. Obliczenia metodą DFT potwierdziły słabsze oddziaływanie klasterów Pd-Au z cząsteczkami wody niż w układach zawierających klastery Pd.



## **PROJEKTY BADAŃ STOSOWANYCH NCBiR**



# 1. HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych



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

wspólnie z Muzeum Narodowym w Krakowie  
(kierownik projektu: prof. Roman Kozłowski)

Celem projektu jest opracowanie dwóch narzędzi wspierających efektywność energetyczną muzeów, bibliotek i archiwów znajdujących się w budynkach zabytkowych: oprogramowanie służące ilościowej ocenie zagrożenia obiektów wrażliwych na zmiany parametrów klimatu oraz specjalistycznego modułu oprogramowania WUFI® Plus umożliwiającego bardziej precyzyjne modelowanie mikroklimatu i zużycia energii w muzeach, bibliotekach i archiwach.

W celu dokonania oceny bezpieczeństwa warunków przechowywania zbiorów opracowano oprogramowanie HERIE, które analizuje wpływ - na dany obiekt - rocznych (lub kilkuletnich) zmian wilgotności względnej, zmierzonych w określonym pomieszczeniu lub wynikających z proponowanych scenariuszy regulacji klimatu. Tego typu dane mikroklimatyczne są rozkładane na elementarne fluktuacje (funkcje sinusoidalne) przy użyciu transformaty Fouriera. Fluktuacje te z kolei, służą jako dane wejściowe do numerycznych symulacji opartych o metodę elementów skończonych, w których modeluje się proces adsorpcji i dyfuzji pary wodnej, oraz odpowiadające im pola odkształceń w materiale. HERIE, poprzez superpozycję elementarnych deformacji, dostarcza pełny przebieg wilgotnościowego odkształcenia, jakiemu podlegał badany obiekt w odpowiedzi na interesujący użytkownika mikroklimat. W ostatnim kroku obliczany jest wskaźnik zagrożenia, jaki stanowi wyznaczone odkształcenie wilgotnościowe obiektu, w oparciu o odpowiednie kryterium zagrożenia uszkodzeniem, opracowanego np. na podstawie badań laboratoryjnych lub obserwacji konserwatorskich. Symulacje wymiany ciepła i pary wodnej między obiektami tworzącymi zbiory muzealne, biblioteczne i archiwalne, a ich otoczeniem, oparte o metodę elementów skończonych pozwoliły również na ocenę korzystnego buforującego wpływu zbiorów na fluktuacje mikroklimatu. Wyniki tych symulacji zostały sprzężone z modelowaniem warunków klimatu i zużycia energii w budynkach przechowujących zasoby dziedzictwa przy użyciu oprogramowania WUFI®Plus opartego na chwilowej równowadze temperatury i zawartości pary wodnej.

W obecnej fazie projektu uzyskano moduł HERIE analizujący zagrożenie warstwy zaprawy klejowej przez odkształcenia wilgotnościowe podłoża drewnianych o różnej grubości, otwartych jednostronnie lub obustronnie na dyfuzję pary wodnej. Opracowany moduł umożliwia ocenę zagrożeń obrazów na desce, które stanowią jedną z najważniejszych kategorii obiektów dziedzictwa wrażliwych na wahania wilgotności i temperatury. Z kolei dla bibliotek, opracowano model statystycznej półki wypełnionej stojącymi obok siebie książkami w oparciu o pomiary rozmiarów i liczby książek przechowywanych w magazynach Biblioteki Narodowej w Warszawie. Opracowany model pozwolił na przetestowanie wpływu objętości i zagęszczenia zbiorów bibliotecznych i archiwalnych na mikroklimat pomieszczenia. W typowej przestrzeni w bibliotece, w której nie działają urządzenia regulujące klimat, dobowe fluktuacje wilgotności względnej zmniejszają się od 5 do 10% na skutek buforującego wpływu zbiorów.

Obydwa oprogramowania mają charakter otwarty z wciąż poszerzaną bazą obiektów dziedzictwa, które można poddawać analizie. Będą one stale doskonalonymi narzędziami do opracowania racjonalnej strategii regulacji warunków mikroklimatycznych we wnętrzach muzeów, bibliotek czy archiwów, przez ilościowe określanie wzajemnych relacji pomiędzy wielkością zagrożenia (wahania parametrów klimatu), wywoływanymi uszkodzeniami (spękania lub deformacja obiektów), a kosztami regulacji klimatu.



## **PROJEKTY NCBiR "LIDER"**



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

Projekt badawczy "Lider" NCBiR LIDER/33/147/L-3/11/NCBR/2012 [2012-2016]

(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

Celem projektu „Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej” jest opracowanie metody enzymatycznej, regioselektywnego hydroksylowania pochodnych cholesterolu w pozycji C25, z wykorzystaniem nowego enzymu molibdenowego (S25DH). W roku 2015 kontynuowano zadanie 2, tj. opracowanie systemu nadekspresji S25DH w komórkach *E. coli*, badania zmierzające do zwiększenia skali syntezy (zadanie 7) i opracowania metody separacji produktów reakcji z mieszaniny reakcyjnej (zadanie 8). Prowadzono też intensywne prace z zakresu promocji projektu i zabezpieczenia praw własności intelektualnej (zadanie 9).

Prowadzone w poprzednich latach prace nad systemem nadekspresji wykazały problemy z rozpuszczalnością podjednostki  $\alpha$ 1 i brak ekspresji podjednostki  $\beta$ . W ramach prac prowadzonych w roku 2015 potwierdzono ekspresję i produkcję wszystkich podjednostek, jednak okazało się, że nie wszystkie podjednostki enzymu S25DH są rozpuszczalne. Aby przetestować czy inne izoenzymy podjednostki  $\alpha$  będą rozpuszczalne (co może wpłynąć na rozpuszczalność całego kompleksu), przygotowano konstrukty genetyczne zawierające warianty podjednostki  $\alpha$ . W komórkach *E. coli* przeprowadzono nadekspresję enzymu S25DH, a następnie ekstrakty komórkowe wykorzystano do przeprowadzenia testowej reakcji hydroksylacji cholest-4-en-3-onu. Przeprowadzone analizy HPLC wykazały obecność związku, którego czas retencji pokrywał się z użytym standardem reakcji (oczyszczony produkt reakcji natywnego S25DH) dla jednego z izoenzymów. Niestety opracowany system nadekspresji charakteryzuje się niską wydajnością. W ramach prac nad alternatywną metodą syntezy 25-hydroksycholesterolu opracowano również metodę nadekspresji AcmA z *S. denitrificans* – dehydrogenazy 3-ketosteroidowej umożliwiającej katalityczne odwracalne utlenienie cholesterolu do cholest-4-en-3-onu. Niestety uzyskany system nie był w stanie wytworzyć katalitycznie aktywnego białka ze względu na jego niską rozpuszczalność a co za tym idzie brak aktywności katalitycznej.

W ramach zwiększania skali syntezy przeprowadzono jednoetapową syntezę 25-hydroksylowanej witaminy D (dla reaktora o objętości 200 ml uzyskano 96 mg czystego produktu z wydajnością 70%) oraz syntezę 25-hydroksycholesterolu stosując metodę chemo-enzymatyczną (tj. chemiczne utlenienie do cholest-4-en-3-onu, jego enzymatyczna hydroksylacja a następnie chemiczną redukcję, synteza w skali do 70 mg produktu). W obu przypadkach opracowano metody izolacji produktu a czystość produktów scharakteryzowano metodą HPLC-MS oraz NMR. Przetestowano również możliwość zastosowania natywnego (tj. nie rekombinowanego) AcmA do katalizowania pierwszego etapu metody chemo-enzymatycznej (tj. utleniania cholesterolu do cholest-4-en-3-onu).

Ponadto w ramach zabezpieczenia praw własności zgłoszono dwa wnioski patentowe, opracowano ofertę technologiczną oraz opublikowano materiały promocyjne w katalogach Biotech in Europe oraz w Annual Reports PAN. Przedstawiono również ofertę technologiczną na spotkaniach partneringowych Life Science Open Space oraz BioEurope.

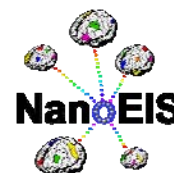


## **PROJEKTY 7. PROGRAMU RAMOWEGO UE**



# 1. NanoEIS Nanotechnology Education for Industry and Society

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



Nanotechnologia jest jedną z kluczowych technologii w przyjętym przez Unię Europejską pakiecie „Horyzont 2020”. Stwarza to poważne wyzwania dla nowoczesnej edukacji i upowszechniania wiedzy w zakresie nanonauki i nanotechnologii. W odpowiedzi na wzrastające zapotrzebowanie na ewaluację istniejącego systemu nauczania w dziedzinie nanotechnologii, w ramach projektu NanoEIS podjęto badania mające na celu ocenę stanu edukacji w zakresie nanotechnologii i sformułowanie rekomendacji dotyczących jej ewentualnych zmian tak, aby odpowiadała ona rzeczywistym potrzebom rynku pracy oraz skutkowała podniesieniem wiedzy ogółu społeczeństwa.

Przeanalizowano programy nauczania nanotechnologii (lub jej elementów) w szkołach średnich i w uczelniach wyższych Europy oraz zbadano, jakie są oczekiwania pracodawców w stosunku do absolwentów kończących ten kierunek.

Z reguły w Europie nanotechnologia nie stanowi osobno nauczanego przedmiotu na poziomie szkół średnich. Edukacja na tym etapie kształcenia koncentruje się raczej wokół klasycznych dziedzin nauki, jakkolwiek pojawiają się czasem treści związane z nanotechnologią. Treści bezpośrednio związane z nanotechnologią pojawiają się dopiero w trakcie 1., 2., oraz 3. stopnia studiów.

Porównanie oczekiwań pracodawców z ofertą uczelni pokazuje znaczący rozdzźwięk. Z jednej strony, wysoko wykwalifikowani absolwenci mogą nie znaleźć zatrudnienia w przemyśle, który z kolei bezskutecznie poszukuje pracowników wyposażonych w specyficzne umiejętności, głównie z następujących dziedzin: zdrowie, bezpieczeństwo, regulacje prawne, środowisko, zagospodarowanie nanomateriałów i ich recykling. Z drugiej zaś, przeanalizowane uniwersyteckie programy nauczania kładą nacisk na klasyczne przedmioty, takie jak charakterystyka/metrologia, nanoelektronika i nanostruktury/kompozyty.

W celu lepszego dopasowania ofert uczelni do potrzeb pracodawców, zaproponowano modelowy program nauczania na kierunku nanotechnologia. Opracowany program studiów odpowiada wymogom procesu bolońskiego. Obejmuje on modułowy program trzyletnich studiów licencjackich, dwuletnich studiów magisterskich, oraz czteroletnich studiów doktoranckich. Zawiera on, oprócz klasycznych przedmiotów nauczanych na uniwersytetach, kursy dające umiejętności i wiedzę spodziewane przez pracodawców. Dla każdego z proponowanych przedmiotów dodano linki do materiałów edukacyjnych, materiałów źródłowych, oraz ewaluacyjnych.

Zbadano również, jakie działania ze strony uczelni wyższych mogą ułatwić wejście absolwentów kierunku nanotechnologia na rynek pracy. Przeprowadzone badania dowodzą, że jest to związane wyłącznie z zaangażowaniem sektora przemysłowego w proces kształcenia. Inna forma udziału przemysłu, np. poprzez zasiadanie ich przedstawicieli w radach programowych (często uznawane za rozwiązanie modelowe) nie przynosi zauważalnego wpływu na liczbę absolwentów zatrudnianych w sektorze nanotechnologii.

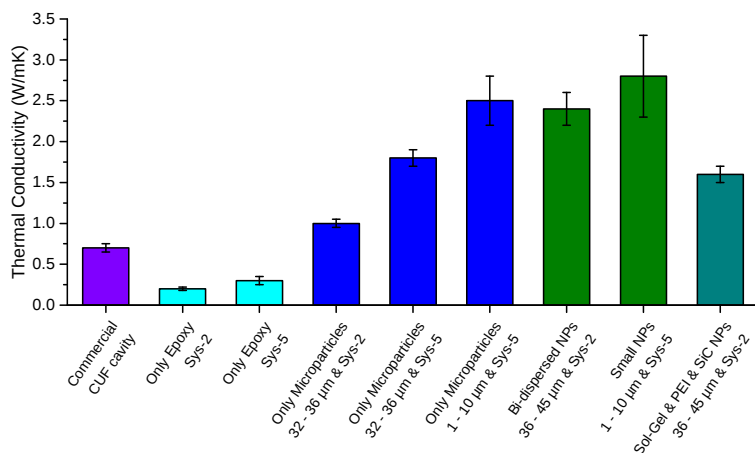
#### 4. HYPERCONNECT Functional Joining of Dissimilar Materials Using Directed Self-assembly of Nanoparticles by Capillary-Bridging

Projekt EC 7<sup>th</sup> FP 310420 HYPERCONNECT (CP) [2013-2015]  
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

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

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

W trzecim roku realizacji projektu kontynuowaliśmy prace mające na celu rozwinięcie technologii tworzenia mostków kapilarnych  $\text{Al}_2\text{O}_3$  metodą zol-żel. Mostki były tworzone pomiędzy modelowymi mikrosferami tlenku aluminium używając izopropanolanu lub tertbutanolan glinu jako prekursora. W następnym etapie do roztworu prekursora wprowadzano nanocząstki materiału o wysokim przewodnictwie cieplnym lub elektrycznym SiC i badano przebieg formowania mostków kapilarnych w takich układach. Stwierdziliśmy, że dodatek 10% wagowych PEI zapobiega pękaniu mostków kapilarnych podczas suszenia. Prostokątne mikrocelki były wypełniane mikrocząstkami  $\text{Al}_2\text{O}_3$  z mostkami kapilarnymi i żywicą epoksydową (dostarczoną przez partnera projektu - Lord). Przewodność cieplna wypełnionych mikrocelek została wyznaczona przez IBM. Była dwa razy większa niż w przypadku dostępnych na rynku napełnień nawet bez optymalizacji składu żywicy epoksydowej. Oczekujemy, że po jego optymalizacji przewodność wzrośnie o 50%. Opracowaliśmy również metodę selektywnej hydrofobizacji płytek mikroobwodów z zastosowaniem aminotioi i fluorosilanów.



Rysunek 1. Porównanie przewodności termicznej mikrocelek z różnymi wypełnieniami. Sys-5 optymalizowana żywica, Sys-2 nieoptymalizowana żywica epoksydowa.

## **PROJEKTY AKCJI COST UE**



## 1. Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials



Projekt EU COST Action CM1101 [2012-2016]

(koordynator: prof. Piotr Warszyński,

przedstawiciel instytucji koordynującej: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

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

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

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

W 2015 roku zorganizowano szereg spotkań w ramach Grup Roboczych (WG): WG2,5, “Colloidal Interactions: Depletion Forces, Molecular Lubrication”, Marcoule, Francja, WG1,6, “Bubble and Drop Interfaces 2015”, Golm, Niemcy. Doroczną konferencję Akcji CM1101 zorganizowano w połączeniu z konferencją ECIS 2015 w Bordeaux, Francja. Szkoły Akcji CM1101 “Interfacial Engineering: Fundamentals, Applications, and Analytical Methods” zorganizowano w Londynie, Wielka Brytania, ESC 2015 w Krakowie. Dodatkowo zorganizowano 15 krótkich staży dla naukowców.

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



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

Projekt EU COST Action CM1305 ECOSTBio [2012-2016]  
(koordynator krajowy: *prof. Ewa Broclawik*)

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

W roku 2015 odbyły się 2 spotkania obejmujące warsztaty naukowe oraz spotkanie Management Committee: The second scientific workshop and Management Committee meeting, Marseille (France), January 12-13, 2015 and The third scientific workshop and Management Committee meeting, Belgrade (Serbia), August 24-25, 2015. Dwa stypendia na krótkie wyjazdy badawcze były przyznane dla Instytutu Katalizy PAN: COST-STSM-CM1305-21775, opiekun: dr Lubomir Benco, Center for computational materials science, Wiedeń (Austria), listopad 2014 – styczeń 2015 (mgr Adam Stępniewski) oraz COST-STSM-CM1305-21782, opiekun: prof. Tomas Bucko, Uniwersytet Komeńskiego, Bratysława (Słowacja), luty 2015 – kwiecień 2015 (mgr Adam Stępniewski).

### 3. PoCheMoN Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience



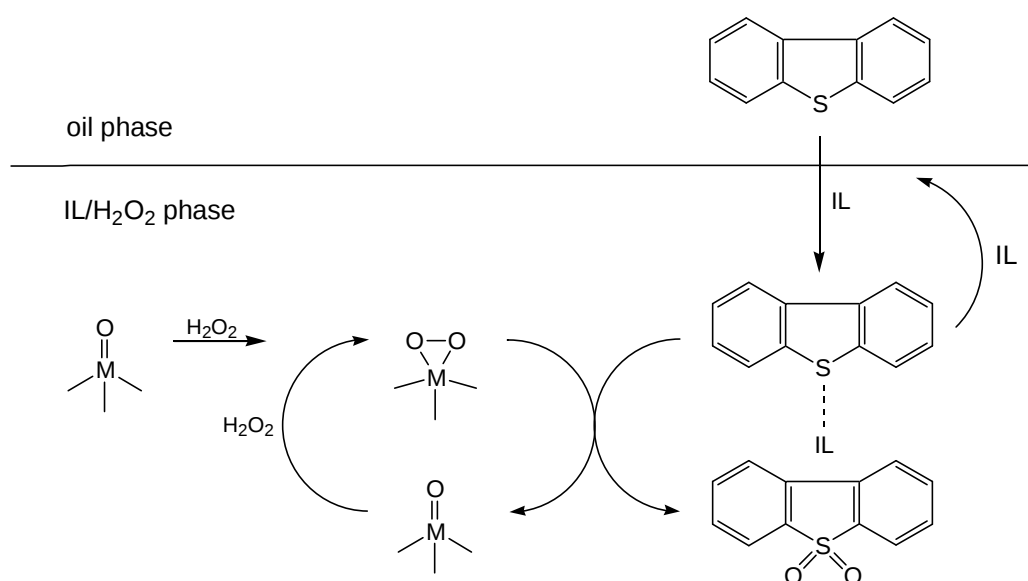
Projekt EU COST Action CM1203 PoCheMoN [2012-2016]

(przedstawiciel: prof. Bogdan Sulikowski)

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

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

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



Do procesu stosowano cieczy jonowe typu  $[\text{Rmim}]\text{HSO}_4$ ;  $[\text{Rmim}]\text{H}_2\text{PO}_4$ , gdzie  $\text{R} = \text{C}_4\text{-C}_{12}$ . W roli emulsyfikatorów i ko-katalizatorów stosowano wybrane cieczy jonowe. Jako katalizatory były stosowane oksometalany fosforo-molibdenowe oraz prekursor POM:  $\text{H}_2\text{WO}_4$  i  $\text{H}_2\text{MoO}_4$ . Uzyskany stopień desulfuryzacji węglowodorów parafinowych był niewysoki i wynosił do 22,2 %.



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

Projekt EU COST Action MP1106 SGI [2012-2016]

*(koordynator krajowy: prof. Kazimierz Małysa)*

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

W roku 2015 spotkanie Management Committee Meeting Akcji COST MP1106 odbyło się w dniu 31 marca w Belgradzie, Serbia. Profesor K. Małysa uczestniczył w tym posiedzeniu.

W roku 2015 pracownicy IKiFP PAN uczestniczyli w 3 konferencjach organizowanych w ramach i przy finansowym wsparciu Akcji COST MP1106.

Dr Marcel Krzan, prof. Kazimierz Małysa oraz dr Jan Zawala uczestniczyli w konferencji "Smart and Green Interfaces Conference - SGIC2015", March 30–April 1, 2015, Belgrade, Serbia, na której przedstawili 2 referaty oraz 2 postery.

Dr Marcel Krzan, mgr inż. Anna Niecikowska oraz prof. Kazimierz Małysa uczestniczyli w konferencji "6<sup>th</sup> International Workshop on "Bubble and Drop Interfaces", July 06-10, 2015 Potsdam/Golm, Germany, na której przedstawili 2 referaty oraz 3 postery.

Prof. Kazimierz Małysa i dr Jan Zawala uczestniczyli w konferencji "Smart and green interfaces: Fundamentals and Diagnostics, Dotchi Exerowa Symposium", 29-31 October, 2015, Sofia, Bulgaria, na której przedstawili 2 referaty oraz 1 poster.

Dr Jan Zawala z IKiFP PAN aplikował i uzyskał finansowanie z Akcji COST P1106 na wyjazd badawczy STSM do TIPS (Transfer, Interfaces & Processes) Laboratory, Faculty of Applied Science, Universite Libre de Bruxelles, Belgia, w okresie od 13-26 marca 2016.

**PROJEKTY POLSKO NORWESKIEJ  
WSPÓŁPRACY BADAWCZEJ**



# 1. NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies Against Neurodegenerative Diseases



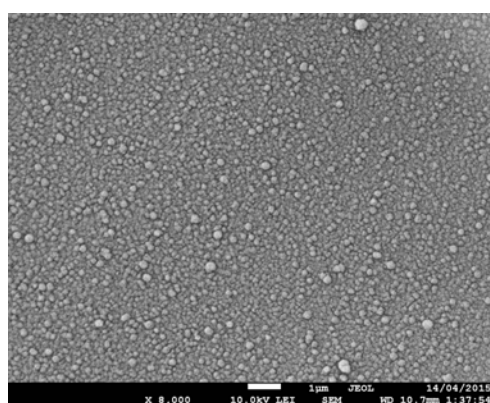
Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej  
199523/64/2013 NANONEURAC (core) [2013-2016]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszński)

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

Głównym celem projektu NanoNeucar jest opracowanie nowej strategii dostarczania leków o działaniu neuroprotektynym przy pomocy nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, a zarazem niewykazujących negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie. Projekt realizowany jest przez konsorcjum naukowe, w którego skład wchodzi trzy instytucje polskie: IKiFP PAN, Instytut Farmakologii PAN i Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ oraz dwie norweskie: SINTEF Materials and Chemistry (SINTEF) oraz Laboratory of Molecular Neuroscience (LMN) Uniwersytetu w Oslo

W 2015 roku w IKiFP PAN skupiono się na preparatyce nanocząstek polimerowych zawierających hydrofobowe leki neuroprotektynne (polidatynę, klozapinę). Nanocząstki zbudowane z polikaprolaktonu (PCL) tworzą z nanoemulsji otrzymanych metodą odwrócenia faz. Otrzymano nanocząstki polimerowe na bazie PCL o średnim rozmiarze 80 nm. Do zastosowań biomedycznych nanocząstki te zostały zmodyfikowane poprzez pegylację. Pegylowane nanocząstki tworzą z udziałem kopolimeru blokowego PEG-b-PCL. Rysunek 1 przedstawia typowy obraz otrzymany za pomocą mikroskopii Cryo-SEM nanocząstek PCL. Testy toksyczności nanocząstek przeprowadzone na wybranych liniach komórkowych wykazały, że są nietoksyczne. Otrzymane nanocząstki zawierające leki neuroprotektynne zostały przekazane partnerom konsorcjum do dalszych badań.



Rysunek 1. Obraz CryoSEM otrzymanych nanocząstek PCL.



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

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

(kierownik projektu: dr Małgorzata Zimowska)

Celem projektu była funkcjonalizacja krzemionkowych nośników kompozytowych, otrzymanych na podstawie syntetycznego minerału warstwowego z grupy smektytów oraz utworzonej pomiędzy jego pakietami mezoporowatej, amorficznej krzemionki. Synteza nanohybrydowych porowatych heterostruktur ilastych typu PCH prowadzona była na drodze hydrolizy i kondensacji tetraetoksylanu w przestrzeniach międzypakietowych syntetycznego Laponitu. Otrzymany kompozyt impregnowano pięciowodnym chlorkiem cyny (IV) rozpuszczonym w wodzie w celu otrzymania układów o stosunku Si/Sn=10, 40 i 60 oraz rozpuszczonym w 2-propanolu syntetyzując kompozyt o Si/Sn=10. Wpływ właściwości fizykochemicznych na aktywność katalityczną otrzymanych kompozytów badano w odniesieniu do właściwości preparatu PCH niezawierającego cyny. W celu określenia roli minerału warstwowego w kompozycie, amorficzną krzemionkę typu MMS bez komponenty mineralnej dotowano cyną rozpuszczoną w wodzie oraz rozpuszczalniku organicznym.

W ramach projektu zbadano właściwości fizykochemiczne: parametry strukturalne i teksturalne, kwasowość oraz skład badanych nanostruktur metodami XRF, XRD, SEM,  $\text{NH}_3$  TPD, adsorpcji/desorpcji  $\text{N}_2$ . Miejsce wprowadzenia Sn, możliwe zmiany w koordynacji oraz stopniu utlenienia zachodzące podczas syntezy oraz zmiany strukturalne kompozytu określono z zastosowaniem metod spektroskopii  $^{29}\text{Si}$  MAS NMR, XPS oraz spektroskopii FTIR w zakresie średnim MIR i bliskim NIR.

Wpływ dotowania porowatych heterostruktur ilastych i amorficznej krzemionki na aktywność katalityczną zweryfikowano w reakcji utleniania cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kaprolaktonu, z zastosowaniem  $\text{H}_2\text{O}_2$  jako czynnika utleniającego (reakcja Baeyera-Villigera). Zgodnie z danymi literaturowymi, jako centra aktywne w tej reakcji mogą brać udział zarówno centra kwasowe Lewisa, jak i centra zasadowe Brönsteda, których obecność stwierdzono w zsyntezowanych preparatach. W projekcie analizowany był wpływ rozwinięcia powierzchni właściwej, dostępności centrów zasadowych, rodzaju nośnika oraz obecności cyny na aktywność katalityczną.

Badania spektroskopowe FTIR dotowanych hybrydowych nanostruktur ilastych, wykazały wbudowanie Sn w sieć amorficznej krzemionki – składowej powstałej podczas syntezy PCH, a spectroscopia Mössbauera  $^{119}\text{Sn}$  MS potwierdziła 30% wbudowanie kationów  $\text{Sn}^{4+}$  w pozycje tetraedryczne. Impregnacja kompozytu PCH cyną spowodowała spadek powierzchni właściwej BET z  $667 \text{ m}^2/\text{g}$  (PCH) do  $515 \text{ m}^2/\text{g}$  (Sn-PCH-10) oraz zmniejszenie się objętości porów, przy zachowaniu zarówno charakteru izotermy adsorpcji azotu, jak i utworzonych w czasie syntezy kompozytu PCH porów. Stopniowe przesuwanie izotermy adsorpcji azotu w kierunku niższych wartości, wraz ze wzrostem ilości dotowania Sn wskazuje częściowe blokowanie układu porów. Wraz ze wzrostem Si/Sn następowała segregacja Sn na granicy ziaren. W rezultacie katalizator o najwyższej zawartości Si/Sn charakteryzował się obecnością około 100 nm krystalitów fazy  $\text{SnO}_2$ . Dodatek cyny poprawił właściwości katalityczne PCH. Katalizator Sn-PCH (Si/Sn=10) charakteryzował się najwyższą selektywnością i wydajnością do  $\epsilon$ -kaprolaktonu. Katalizatory na bazie amorficznej krzemionki (MMS) wykazały niską aktywność utleniania cyklohexanonu. Dodatek cyny poprawił ich selektywność do  $\epsilon$ -kaprolaktonu, chociaż aktywność była nadal stosunkowo niska. Wyniki te potwierdziły konieczną obecność składnika mineralnego w celu uzyskania wysokiej wydajności do  $\epsilon$ -kaprolaktonu. Efekt przypisano obecności zasadowych miejsc w oktaedrycznych warstwach minerału ilastego.

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



Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej

ID 199380 InLinePV (core) [2014-2016]

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

Cena modułów fotowoltaicznych ogranicza ich wykorzystanie jako źródeł energii elektrycznej w życiu codziennym. Istotnym składnikiem tej ceny jest koszt wytwarzania złącz  $n^+/p$  i  $p/p^+$  generowany na oddzielnych etapach, który może zostać obniżony w przypadku zastosowania procesów taśmowych. Celem projektu InLinePV jest opracowanie prostych, obojętnych dla środowiska i tanich metod domieszkowania krzemu, aby wytworzyć konieczne złącza.

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

Partnerzy projektu pracują nad opracowaniem nowej technologii tworzenia złącz  $n^+/p$  i  $p/p^+$  na krzemie, które to złącza są konieczne do wystąpienia zjawiska fotoelektrycznego będącego podstawą dla działania ogniw fotowoltaicznych. Dotowanie krzemu fosforem, jako składnikiem złącza, jest wykonywane z obojętnych dla środowiska ciekłych źródeł w przeciwieństwie do toksycznego i kłopotliwego w użyciu  $\text{POCl}_3$  znajdującego zastosowanie w przemyśle. Uzyskano źródło fosforu pozwalające na wytworzenie odpowiedniego profilu domieszki oraz na uzyskanie sprawności ogniwa analogicznej do otrzymanej z  $\text{POCl}_3$  przy znaczącym obniżeniu kosztów procesu.

Dodatkowo, osiągnięcie niskiej refleksyjności powierzchni krzemu jest istotne z uwagi na konieczność efektywnej absorpcji światła, co prowadzi do podwyższenia sprawności ogniw fotowoltaicznych. Jedną z dróg podwyższenia absorpcji światła jest teksturyzacja powierzchni krzemu metodą trawienia powierzchniowego. Trawienie w obecności metalu (metal assisted etching - MAE), gdzie cząstka metaliczna jest katalizatorem działającym w miejscu styku z krzemem, może być zastosowane w tym celu. W projekcie badano trawienie krzemu metodą MAE przy udziale katalizatorów metalicznych (Pd, Ag, Au) i bimetalicznych. Po procesie trawienia, uzyskano refleksyjność i skład powierzchni odpowiedni do zastosowań przemysłowych.

W celu podniesienia sprawności wytwarzanych ogniw zastosowano niskowymiarowe struktury wykazujące właściwości plazmoneczne oraz tzw. konwertery światła. W skali laboratoryjnej uzyskano układy o sterowalnej absorpcji i emisji promieniowania elektromagnetycznego w zakresie światła widzialnego. Podjęto działania w celu uzyskania odpowiedniej dyspersji nakładanych cząstek i ich adhezji do powierzchni krzemu.



## **PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE**



# 1. ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości



PO KL 4.1.1. [2009-2015] ISD

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

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

Zadania naukowe realizowane w ramach ISD obejmują fizyczne, chemiczne i technologiczne aspekty wiedzy o materiałach oraz nowoczesnej energetyki. Projekt realizowany jest od 2009 roku. W roku 2015 w jednostkach partnerskich studiowało 32 doktorantów (IV/V rok - 15 osób, V rok - 17 osób), w tym w IKiFP PAN 8 osób ((IV/V rok - 3 osoby, V rok - 5 osób)

W IKiFP PAN w roku 2015, 11 kolejnych osób obroniło pracę doktorską: Katarzyna Kubiak (promotor: prof. Zbigniew Adamczyk) "Stabilność monowarstw nanocząstek srebra na powierzchniach granicznych - badania AFM i QCM"; Łukasz Kuterasiński (promotor: prof. Mirosław Derewiński) "Natura protonowych centrów kwasowych w zeolitach typu MFI podstawionych izomorficznie borem"; Mateusz Gackowski (promotor: prof. Mirosław Derewiński) "Monolity krzemionkowe z naniesionymi nanocząsteczkami zeolitu jako modelowe mikroreaktory przepływowe"; Piotr Batys (promotor: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP) "Właściwości powierzchni nanocząstek i mechanizm ich transportu w układach wielowarstwowych"; Anna Dziedzicka (promotor: prof. Bogdan Sulikowski) "Modyfikowane zeolity jako katalizatory transformacji terpenów"; Żaneta Kalemba-Jaje (promotor: prof. Alicja Drelinkiewicz) "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności stałych polimerowych katalizatorów kwasowych"; Anna Miłaczewska (promotor: dr hab. Tomasz Borowski prof. IKiFP) "Badania nad strukturą i mechanizmem katalitycznego działania wybranych metaloenzymów niehemowych"; Piotr Niemiec (promotor: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP) "Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów"; Maciej Tatko (promotor: dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP) "Nowe materiały na podstawie tlenków metali ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych ogniach paliwowych"; Justyna Dziedzic (promotor: prof. Piotr Warszyński) "Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami"; Katarzyna Onik (promotor: prof. Mirosław Derewiński) "Nowe materiały hierarchiczne oparte na nanoklasternach zeolitów jako podstawa nowoczesnych układów katalitycznych".

W sumie wszystkie 17 osób będących beneficjentami projektu, które prace realizowały w IKiFP PAN, zakończyło z powodzeniem realizację projektu, broniąc pracę doktorską (w tym dwie osoby z wyróżnieniem). Obok osób wymienionych powyżej, w 2014 roku pracę doktorską obroniły: Anna Pajor-Świerzy (promotor: prof. Piotr Warszyński) "Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami"; Małgorzata Kopeć (promotor: dr hab. Paweł Nowak, prof. IKiFP) "Kompozytowe pokrycia antykorozyjne na podstawie żywic epoksydowych"; Magdalena Nosek (promotor: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP) "Zastosowanie techniki wirującej elektrody dyskowej do badania cienkich filmów koloidalnych"; Anna Szymańska (promotor: prof. Wiesław Łasocha) "Polimetalany i peroksokompleksy jako materiały do zastosowań w katalizie, medycynie i przemyśle"; Marta Grzesiak-Nowak (promotor: prof. Wiesław Łasocha) "Polimery koordynacyjne oraz związki metaloorganiczne typu MOF - materiały dla katalizy, inżynierii krystalicznej"; w 2013 roku Magdalena Oćwieja (promotor: prof. Zbigniew Adamczyk) "Kinetyka tworzenia oraz struktura nanocząstek srebra na powierzchniach heterogenicznych".



## 2. BIOTRANSFORMACJE użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym

### Zadanie 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych

PO IG 1.3.1 [2009-2015] BIOTRANSFORMACJE  
(kierownik projektu: dr hab. Maciej Szaleniec)

#### Zadanie 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych

W ramach realizacji zadania prowadzono badania nad dwoma systemami enzymatycznymi katalizującymi syntezę chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych: dehydrogenazą etylobenzenową (EBDH) i dehydrogenazą fenyletanolową (PEDH).

W roku 2015 realizowano wyłącznie prace dokończające badania projektu, ze względu na osiągnięcie końca harmonogramu badawczego z końcem roku 2014.

W ramach tych prac przeprowadzono serię dodatkowych testów i przygotowań do wdrożenia PEDH do partnera przemysłowego, firmy TriMEN. Przeprowadzono testy czystości optycznej związków wyprodukowanych w firmie TriMEN za pomocą PEDH i zaoferowano firmie zakup katalizatora (ekstraktu komórkowego), który umożliwiłby przeprowadzenie wdrożenia bez uzyskiwania pozwolenia na GMO i niezbędnych w takiej sytuacji inwestycji aparaturowych i kadrowych.

Niestety w związku ze zmianami planów firmy TriMEN i de facto zawieszenia działalności spółki na rynku syntezy chemicznej plany te nie zostały zrealizowane. W związku z tym skupiono się na dopracowaniu układu przepływowego dla PEDH oraz przygotowaniu potencjalnej oferty sprzedaży optycznie czystych alkoholi chiralnych przez IKiFP PAN.

W ramach realizacji tych celów przeprowadzono optymalizację układów przepływowych w oparciu o krzemionkowy katalizator monolityczny, modyfikowany powierzchniowo grupami linkera. Na takim nośniku enzym był immobilizowany kowalencyjnie. Zabezpieczono również dostęp do rekombinowanych plazmidów *R*-specyficznej dehydrogenazy fenyletanolowej oraz EBDH. Przeprowadzono transfekcję komórek *E.coli* genami *R*-specyficznej dehydrogenazy uzyskując w ten sposób dostęp do obu katalizatorów pochodzących z EbN1. Analiza stanu ochrony patentowej obu enzymów wykazała, że od początku roku 2014 nie obowiązuje ochrona patentowa dla enzymu *S*-specyficznego na terenie całej Europy natomiast na *R*-specyficzny obowiązuje ochrona tylko w kilku krajach Europy (nie w Polsce). Ofertę na produkcję alkoholi metodą PEDH wystawiono na wewnętrznym serwisie PODIO Kłaster Life Science.

Ponadto kontynuowano badania nad EBDH. Przebadano enancjoselektywność enzymu rekombinowanego o sekwencji natywnej oraz 3 mutantów powstałych w wyniku zamiany jednego aminokwasu w centrum aktywnym. W ten sposób testowano hipotezę, że wybrane aminokwasy odpowiadają za różnicowanie aktywacji pro(*S*) i pro(*R*) etylobenzenu. Wstępne badania wykazały, że enzym jest aktywny i nie traci swojej enancjoselektywności dla sekwencji natywnej. Natomiast preparat wykorzystany w testach aktywności zawierał silne zanieczyszczenie dehydrogenaz alkoholowych, które większość produktu konwertowały do acetofenonu. W związku z tym nie było możliwe wyznaczenie enancjoselektywności mutantów.

### 3. ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny

PO KL 4.1.1. [2010-2015] ISD MOLMED

(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)



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

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

W ramach Projektu pracownicy naukowcy jednostek partnerskich poszerzali kompetencje dydaktyczne poprzez udział w krajowych i zagranicznych szkoleniach specjalistycznych. Łącznie zorganizowano 95 osobo-szkoleń związanych z najnowszymi trendami i osiągnięciami w badaniach naukowych, nowymi metodami i technikami badawczymi w określonych dziedzinach nauki, nowoczesnymi metodami analizy danych, obsługą specjalistycznej aparatury badawczej, itp.

W ramach ISD w roku 2015 doktoranci kontynuowali badania naukowe w jednostkach partnerskich, otrzymywali miesięczne stypendia oraz dokonywali zakupów materiałów niezbędnych do realizacji prac doktorskich. Ponadto uczestniczyli w seminariach zgodnie z Programem Ramowym studiów oraz brali udział w konferencjach naukowych krajowych i zagranicznych, na których prezentowali wyniki swoich badań w postaci wystąpień ustnych i posterów. Nad przebiegiem realizacji projektu czuwała Rada Programowa składająca się z 8 członków – po dwóch reprezentantów z każdej jednostki partnerskiej.

Ponadto zorganizowano w IKiFP PAN 3 wykłady z udziałem zaproszonych wykładowców:

- dr n. med. Jakub Antczak (WL CM UJ) "Zastosowanie badań elektrofizjologicznych w diagnostyce chorób układu nerwowego"
- dr hab. Krzysztof Tokarski (IF PAN) "Metody elektrofizjologiczne stosowane w badaniach mózgu in vitro"
- dr hab. Konrad Szaciłowski (AGH) "Cząsteczki na powierzchni. Od elementarnych oddziaływań do bramek logicznych i sztucznych neuronów"

Zorganizowano i przeprowadzono obrony rozpraw doktorskich doktorantów z IKiFP PAN (6 osób), IF PAN (9 osób), WCh UJ (11 osób), WL CM UJ (13 osób), a Rady Wydziału/Rady Naukowe nadały doktorantom stopień naukowy. Łącznie w związku z realizacją projektu stopień naukowy doktora nadano 39 uczestnikom projektu.



## **INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE**



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

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

Celem prowadzonych w ramach projektu badań było zaprojektowanie i synteza modyfikowanych polikationami polimeru minerałów ilastych, jako nośników do immobilizacji i stabilizacji nanocząstek metalicznych, w obszarach ograniczonej przestrzeni międzywarstwowej.

Organiczne pochodne warstwowych krzemianów otrzymano poprzez stopniową delaminację naturalnie występującego smektytu - Jelszowego Potoku (JP) oraz syntetycznego Laponitu RD<sup>®</sup> (Lap), a następnie wprowadzenie, jako czynnika stabilizującego, długich łańcuchów polimeru p-DADMACl (chlorku polydiallyldimetyloamoniowego) o masie cząsteczkowej 400 000-500 000 i stosunku wagowym JP/Lap:p-DADMACl równym 1:0,05; 1:0,25 oraz 1:3, zawierających 2% RuCl<sub>3</sub>. W konsekwencji kompozyty otrzymano w wyniku oddziaływania Ru/PDDA z ujemnie naładowanymi pakietami materiałów ilastych po delaminacji. Jako referencję otrzymano układy Ru-JP i Ru-Lap, nie zawierające komponenty polimerowej. Ze względu na obecność kationów Ru<sup>3+</sup> i kationową naturę p-DADMACl oraz anionowy charakter warstw montmorylonitu utrzymanie polimeru oraz jonów rutenu, pomiędzy warstwami minerału ilastego, możliwe było dzięki stosunkowo dużym siłom elektrostatycznym oraz konkurencyjności w oddziaływaniu kationów z warstwami minerału. Otrzymane organiczne pochodne zawierające jony Ru poddano redukcji za pomocą NaBH<sub>4</sub>.

Ilość p-DADMACl wpłynęła na konfigurację i stopień uporządkowania polikationów p-DADMA w przestrzeniach międzywarstwowych. Analiza XRD wykazała wzrost odległości  $d_{001}$  w próbkach p-DADMA-Jp\_1:0,05 i p-DADMA-Lap1:0,05 (1,55nm) w stosunku do układów niemodyfikowanych (1,25 nm), co świadczy o interkalacji polikationów w przestrzeni międzypakietowej. Wprowadzenie większej ilości polikationu do zawiesiny minerału warstwowego (1:0,25) skutkowało większą ekspansją odległości międzypłaszczyznowej (1,63 nm). Duży nadmiar polimeru p-DADMACl w stosunku do minerału warstwowego (1:3), nie wpłynął na zwiększenie odległości międzypakietowej otrzymanej organicznej pochodnej.

Analizy SEM-EDX oraz XRF potwierdziły wprowadzenie Ru w strukturę modyfikowanych minerałów ilastych oraz zdyspergowanie cząsteczek metalicznych w otrzymanym kompozycie, zależnych od stopnia delaminacji pakietów montmorylonitu i zawartości p-DADMA.

Rozmiar, stan agregacji oraz stabilność wprowadzonych nanocząstek metalicznego Ru kontrolowanych na drodze doboru stężenia stabilizatora oraz jego konfiguracji w przestrzeniach międzypakietowych weryfikowano w reakcji uwodornienia 2-butanonu.

Prowadzone badania mają bardzo duże znaczenie w zastosowaniu przyjaznych środowiskowo minerałów ilastych do reakcji katalitycznych, są także istotne w obszarach inżynierii materiałowej, gdzie optymalizacja warunków syntezy wpływa na poprawę właściwości fizykochemicznych i katalitycznych otrzymanych materiałów.



## **PROJEKTY PROGRAMU ERASMUS+**



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



Projekt 2014-1-PL01-KA103-000225 [2014-2015]

Projekt 2015-1-PL01-KA103-014791 [2015-2016]

(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 latach 2014 i 2015 zrealizowano dotychczas następujące wyjazdy doktorantów (2-3 miesięczne praktyki):

- Michał Skoczek - Uppsala University
- Aleksandra Kirpsza - University of Oslo
- Tomasz Szumelda - Aston University, Birmingham
- Joanna Olszówka - University of Cambridge
- Karolina Podgórna - University of Chemistry and Technology, Praga

oraz pracowników (kilkudniowe szkolenia):

- Barbara Jachimska - University of Strathclyde, Glasgow
- Marcel Krzan - Institute of Physical Chemistry Bulgarian Academy of Sciences, Sofia
- Marcel Krzan - University of Liège
- Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk - University of Santiago de Compostela
- Robert Kosydar - Aston University, Birmingham
- Michał Mosiałek - Vilnius University

Instytut gościł w tym czasie 2 doktorantów (z Uniwersytetu w Glasgow) i 1 pracownika (z Uniwersytetu w Vaasa w Finlandii)

Efektom zagranicznych pobytów było także zebranie materiału badawczego do 1 pracy doktorskiej, do 3 artykułów w czasopiśmie naukowych o międzynarodowym zasięgu i do 11 prezentacji konferencyjnych (plakatów i komunikatów) na krajowych i zagranicznych konferencjach naukowych (w Wielkiej Brytanii, Bułgarii, Holandii, Niemczech, Włoszech, Serbii).

Program będzie kontynuowany w roku 2016 (przewidywane są jeszcze 2 wyjazdy doktorantów i 3 wyjazdy pracowników), a na rok szkolny 2016/2017 złożono kolejny wniosek o finansowanie.



# **DOROBK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2015**

## **PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM**

### **MONOGRAFIE**

1. R.Tadeusiewicz, M.Szaleniec "Leksykon sieci neuronowych", Wydawnictwo Fundacji 'Projekt Nauka', Wrocław 2015, pp. 134 [ISBN 987-83-63270-12-4]

### **ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH**

1. E.Bielańska, A.Drelinkiewicz, R.Dula, R.Grabowski, R.Kosydar, E.Lalik, T.Machej, L.Matachowski, P.Nowak, A.Pacula, W.Rojek, E.Serwicka-Bahranowska, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Projektowanie katalizatorów do rekombinacji wodoru I tlenu pod kątem ich aktywności jako czynnika o krytycznym znaczeniu dla bezpieczeństwa pracy rekombinatorów w instalacjach nuklearnych", "Analiza procesów generacji wodoru w reaktorze jądrowym w trakcie normalnej eksploatacji i w sytuacjach awaryjnych z propozycjami działań na rzecz podniesienia poziomu bezpieczeństwa jądrowego" (A.Bojanowska-Czajka, ed.), Instytut Chemii i Techniki Jądrowej, Warszawa 2015, p.73-93 [ISBN 978-83-933935-5-8]
2. E.Broclawik, Z.Stasicka "Teorie wiązania chemicznego w kompleksach metali", in: "Podstawy i perspektywy chemii koordynacyjnej. T.1. Podstawy chemii koordynacyjnej" (Z.Stasicka, G.Stochel, eds.) Wydawnictwo UJ, Kraków 2014, p.151-194 [ISBN: 978-83-23337-73-7] – wydano w 2015
3. E.Broclawik, Z.Stasicka "Spektroskopia elektronowa", in: "Podstawy i perspektywy chemii koordynacyjnej. T.1. Podstawy chemii koordynacyjnej" (Z.Stasicka, G.Stochel, eds.) Wydawnictwo UJ, Kraków 2014, p.195-244 [ISBN: 978-83-23337-73-7] – wydano w 2015
4. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Ruggiero, A.Żelazny, M.Śliwa "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne katalizatorów miedziowych w reakcji uwodornienia CO<sub>2</sub> w kierunku eteru dwumetylowego (DME)", in: "Badania i Rozwój Młodych Naukowców w Polsce - Nauki techniczne i inżynieryjne, Tom I", Wydawnictwo Młodzi Naukowcy, Poznań 2015, p.113 [ISBN 978-83-942083-7-0]
5. K.Pamin "Heteropolizwiązki jako katalizatory transformacji węglowodorów", in: "Elektrochemia stosowana" (B.Baś, M.Jakubowska, W.W.Kubiak, eds.), Wydawnictwo Naukowe Akapit, Kraków 2015, p.259-281 [ISBN 978-83-63663-58-2]
6. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, W.W.Kubiak "Badanie właściwości katalitycznych i elektrochemicznych soli kobaltowych kwasu fosfowolframowego i fosfomolibdenowego w reakcji utleniania fenolu", in: "Elektrochemia stosowana" (B.Baś, M.Jakubowska, W.W.Kubiak, eds.), Wydawnictwo Naukowe Akapit, Kraków 2015, p. 283-290 [ISBN 978-83-63663-58-2]
7. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Understanding the Mechanism of Gas-to-Liquid Processes with an Aid of Quantum Chemistry Tools; Case Studies of the Shilov Reaction and Natural Gas Aromatization", in: "Small-Scale Gas to Liquid Fuel Synthesis" (ed. N.Kanellopoulos, ed.), CRC Press, Boca Raton 2015, p.401-428 [ISBN 9781466599383]

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

1. K.Bahranowski, W.Włodarczyk, E.Wisła-Walsh, A.Gaweł, J.Matusik, A.Klimek, B.Gil, A.Michalik-Zym, R.Dula, R.P.Socha, E.M.Serwicka "[Ti,Zr]-pillared montmorillonite - A new quality with respect to Ti- and Zr-pillared clays", *Microporous Mesoporous Mater.*, 202 (2015) 155-164
2. A.Barbasz, M.Oćwieja, J.Barbasz "Cytotoxic Activity of Highly Purified Silver Nanoparticles Sol Against Cells of Human Immune System", *Appl. Biochem. Biotechnol.*, 176 (2015) 817-834
3. P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek, P.Weroński "Synthesis and quantitative characterization of non-conductive colloidal particle multilayers", *Electrochim. Acta*, 164 (2015) 71-80
4. P.Batys, M.Nosek, P.Weroński "Structure analysis of layer-by-layer multilayer films of colloidal particles", *Appl. Surf. Sci.*, 332 (2015) 318-327
5. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrodechlorination of CCl<sub>4</sub> over carbon-supported palladium-gold catalysts prepared by the reverse 'water-in-oil' microemulsion method", *Compt. Rend. Chim.*, 18 (2015) 1143-1151
6. P.Boroń, L.Chmielarz, J.Gurgul, K.Łątka, B.Gil, B.Marszałek, S.Dźwigaj "Influence of iron state and acidity of zeolites on the catalytic activity of FeHBEA, FeHZSM-5 and FeHMOR in SCR of NO with NH<sub>3</sub> and N<sub>2</sub>O decomposition", *Microporous Mesoporous Mater.*, 203 (2015) 73-85
7. T.Borowski, M.Quesne, M.Szaleniec "QM and QM/MM methods compared: case studies on reaction mechanisms of metalloenzymes", *Adv. Protein Chem. Struct. Biol.*, 100 (2015) 187-224
8. Ł.Bratasz, M.Łukomski, A.Klisińska-Kopacz, W.Zawadzki, K.Dzierżęga, M.Bartosik, J.Sobczyk, F.J.Lennard, R.Kozłowski "Risk of climate-induced damage in historic textiles", *Strain*, 51 (2015) 78-88
9. A.Brzyska, P.Borowski, K.Woliński "Solvent effects on the nitrogen NMR chemical shifts in 1-methylazoles – a theoretical study", *New J. Chem.*, 39 (2015) 9627-9640
10. K.Drabczyk, P.R.Socha, A.Skwarek "Copper deposition on screen printed electrical paths for solar cell application", *Circuit World*, 41 (2015) 98-101
11. A.Dudzik, W.Snoch, P.Borowiecki, J.Opalińska-Piskorz, M.Witko, J.Heider, M.Szaleniec "Asymmetric reduction of ketones and  $\beta$ -keto esters by (S)-1-phenylethanol dehydrogenase from denitrifying bacterium *Aromatoleum aromaticum*", *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 99 (2015) 5055-5069
12. S.S.Dukhin, V.I.Kovalchuk, M.Lotfi, M.Krzan, K.Małyś, R.Miller "Dynamics of Rear Stagnant Cap Formation at the Surface of Rising Bubbles in Surfactant Solutions for Small Marangoni Number and Slow Sorption Kinetics", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 222 (2015) 260-274

13. M.Elżbieciak-Wodka, M.Kolasińska-Sojka, P.Nowak, P.Warszyński "Comparison of permeability of poly(allylamine hydrochloride)/ and poly(diallyldimethylammonium chloride)/poly(4-styrenesulfonate) multilayer films: linear vs. exponential growth", *J. Electroanal. Chem.*, 738 (2015) 195-202
14. U.Filek, A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka, E.Lalik, A.Bielański "Ethanol conversion over cesium-doped mono- and bi-cationic aluminum and gallium  $H_3PW_{12}O_{40}$  salts", *J. Mol. Catal. A*, 407 (2015) 152-162
15. J.Gao, Y.T.Zheng, Y.D.Tang, J.M.Jehng, R.Gryboś, J.Handzlik, I.E.Wachs, S.G.Podkolzin "Spectroscopic and Computational Study of Cr Oxide Structures and Their Anchoring Sites on ZSM-5 Zeolites", *ACS Catal.*, 5 (2015) 3078-3092
16. M.Grzesiak-Nowak, G.Appleby, W.Łasocha "Powder Diffraction and Synchrotron Radiation, a Powerful Tool in the Investigation of New Compounds:  $CdBr_2(3\text{-fluoroaniline})_2$  and  $CdBr_2(4\text{-fluoroaniline})_2$ ", *X-Ray Spectr.*, 44 (2015) 398-403
17. K.E.Hnida, S.Baessler, L.Akinsinde, J.Gooth, K.Nielsch, R.P.Socha, A.Laszcz, A.Czerwiński, G.D.Sulka "Tuning the polarity of charge transport in InSb nanowires via heat treatment", *Nanotechnology*, 26 (2015) 285701
18. J.M.del Hoyo-Melendez, P.Świt, M.Matosz, M.Woźniak, A.Klisińska-Kopacz, Ł.Bratasz "Micro-XRF analysis of silver coins from medieval Poland", *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, 349 (2015) 6-16
19. K.Hupert-Kocurek, D.Wojcieszynska, U.Guzik, T.Borowski, "A single amino acid substitution within catalitically nonactive N-terminal domain of catechol 2,3-dioxygenase (C23O) increases enzyme activity towards 4-chlorocatechol", *J. Mol. Catal. B*, 122 (2015) 64-71
20. D.Jantas, M.Piotrowski, W.Lasoń "An Involvement of PI3-K/Akt Activation and Inhibition of AIF Translocation in Neuroprotective Effects of Undecylenic Acid (UDA) Against Pro-Apoptotic Factors-Induced Cell Death in Human Neuroblastoma SH-SY5Y Cells", *J. Cellular Biochem*, 116 (2015) 2882-2895
21. A.Jeziorna, K.Stopczyk, E.Skorupska, K.Luberda-Durnaś, M.Oszajca, W.Łasocha, M.Górecki, J.Frelek, M.J.Potrzebowski "Cyclic Dipeptides as Building Units of Nano- and Microdevices: Synthesis, Properties, and Structural Studies", *Crystal Growth & Design*, 15 (2015) 5138-5148
22. M.Kopeć, K.Szczepanowicz, G.Mordarski, K.Podgórna, R.P.Socha, P.Nowak, P.Warszyński, T.Hack "Self-healing epoxy coatings loaded with inhibitor-containing polyelectrolyte nanocapsules", *Progr. Organic Coatings*, 84 (2015) 97-106
23. K.P.Korona, T.Korona, D.Rutkowska-Żbik, S.Grankowska-Ciechanowicz, A.Iwan, M.Kamińska "Polyazomethine as a component of solar cells - theoretical and optical study", *J. Phys. Chem. Solid.*, 86 (2015) 186-193

24. D.Kosior, J.Zawała, A.Nieczkowska, K.Małyś "Influence of non-ionic and ionic surfactants on kinetics of the bubble attachment to hydrophilic and hydrophobic solids", *Colloid Surf. A*, 470 (2015) 333-341
25. M.Krośnicki, M.Strojecki, T.Urbańczyk, A.Pashov, J.Koperski "Interatomic potentials of the heavy van der Waals dimer Hg<sub>2</sub>: A "test-bed" for theory-to-experiment agreement", *Phys. Reports*, 591 (2015) 1-31
26. T.Kruk, K.Szczepanowicz, J.Stefańska, R.P.Socha, P.Warszyński "Synthesis and antimicrobial activity of monodisperse copper nanoparticles", *Colloid Surf. B*, 128 (2015) 17-22
27. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, E.Rogalska "Effect of products of PLA2 catalyzed hydrolysis of DLPC on motion of rising bubbles", *Colloid Surf. B*, 128 (2015) 261-267
28. L.Krzemień, M.Łukowski, A.Kijowska, B.Mierzejewska "Combining Digital Speckle Pattern Interferometry with Shearography in a New Instrument to Characterize Surface Delamination in Museum Artefacts", *J. Cult. Herit*, 16 (2015) 544-550
29. L.Krzemień, M.Strojecki, S.Wroński, J.Tarasiuk, M.Łukowski "Dynamic response of earlywood and latewood within annual growth ring structure of Scots pine subjected to changing relative humidity", *Holzforschung*, 69 (2015) 555-561
30. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Kinetics of Silver Nanoparticle Deposition at PAH Mono layers: Reference QCM Results", *Langmuir*, 31 (2015) 2988-2996
31. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska "Mechanisms of fibrinogen adsorption at the silica substrate determined by QCM-D measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 457 (2015) 378-387
32. K.Kubiak-Ossowska, M.Ćwięka, A.Kaczyńska, B.Jachimska, P.Mulheran, "Lysozyme adsorption at a silica surface using simulation and experiment: effects of pH on protein layer structure", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17 (2015) 24070-24077
33. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Cieśla, M.Adamczyk "High density monolayers of plasmid protein on latex particles: experiments and theoretical modeling", *J. Stat. Mechanic - Theory Exp.*, (2015) P04003
34. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Morga, K.Sofinska "Recombinant albumin adsorption on mica studied by AFM and streaming potential measurements", *Colloid Surf. B*, 127 (2015) 192-199
35. M.Kujda, Z.Adamczyk, Sz.Zapotoczny, E.Kowalska "Electrokinetic characteristics of HSA dimer and its monolayers at mica", *Colloids Surf. B*, 136 (2015) 1207-1214
36. M.Kujda, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, O.Bocheńska, G.Braś, A.Kozik, E.Bieleńska, J.Barbasz "Charge Stabilized Silver Nanoparticles Applied as Antibacterial Agents", *J. Nanosci. Nanotechnol.*, 15 (2015) 3574-3583

37. E.Lalik, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, W.Rojek, T.Machej, J.Gurgul, T.Szumelda, M.Kołodziej, E.Bielańska "Activity and deactivation of Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts in hydrogen and oxygen recombination reaction; a role of alkali (Li, Cs) dopant", *Int J. Hydrogen Energy*, 40 (2015) 16127-16136
38. E.Lalik, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, T.Szumelda, E.Bielańska, D.Groszek, A.Iannetelli, M.Groszek "Oscillatory behavior and anomalous heat evolution in recombination of H<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> on Pd-based catalyst", *Ind Eng. Chem. Res.*, 54 (2015) 7047-7058
39. E.Lalik, R.Kosydar, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, T.Szumelda, M.Kołodziej, W.Rojek, T.Machej, E.Bielańska, A.Drelinkiewicz "Humidity induced deactivation of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and SiO<sub>2</sub> supported Pd, Pt, Pd-Pt catalysts in H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> recombination reaction: the catalytic, microcalorimetric and DFT studies", *Appl. Catal. A*, 501 (2015) 27-40
40. J.Li, S.L.Yoong, W.J.Goh, B.Czarny, Z.Yang, K.Poddar, M.M.Dykas, A.Patra, T.Venkatesan, T.Pańczyk, C.Lee, G.Pastorin "In vitro controlled release of cisplatin from gold-carbon nanobottles via cleavable linkages", *Int. J. Nanomed.*, 10 (2015) 7425-7441
41. J.I.Loch, P.Bonarek, A.Polit, S.Świątek, M.Czub, M.Ludwikowska, K.Lewiński "Conformational variability of goat  $\beta$ -lactoglobulin: Crystallographic and thermodynamic studies", *Int. J. Biol. Macromol.*, 72 (2015) 1283-1291
42. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Formation of ZnSe and ZnS Nanostructures from Hybrid Organic-inorganic Precursors of the Type ZnSe(m-xylylenediamine)<sub>1/2</sub> and ZnS(1,3-diaminopropane)<sub>1/2</sub>", *Cryst. Res. Technol.*, 50 (2015) 716-723
43. D.Majda, W.Makowski, M.Mańko, K.Mlekodaj, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Porosity characterization of SBA-15 silicas with thermoporosimetry of water and n-alkanes – The effect of the probe liquid nature", *Microporous Mesoporous Mater.*, 201 (2015) 141-150
44. A.Marczewska, M.Środa, M.Nocuń, B.Sulikowski "Lead-gallium glasses and glass-ceramics doped with SiO<sub>2</sub> for near infrared transmittance", *Optical Mater.*, 45 (2015) 121-130
45. A.Michalik-Zym, R.Dula, D.Duraczyńska, J.Kryściak-Czerwenka, T.Machej, R.P.Socha, W.Włodarczyk, A.Gawel, J.Matusik, K.Bahranowski, E.Wisła-Walsh, E.L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Active, selective and robust Pd and/or Cr catalysts supported on Ti-, Zr- or [Ti,Zr]-pillared montmorillonites for destruction of chlorinated volatile organic compounds", *Appl. Catal. B*, 174 (2015) 293-307
46. A.Michna, Z.Adamczyk, P.Batys "Mapping single macromolecule chains using the colloid deposition method: PDADMAC on mica", *J. Colloid Interface Sci.*, 450 (2015) 82-90
47. M.Morga, Z.Adamczyk, S.Goedrich, M.Oćwieja, G.Papastavrou "Monolayers of poly-L-lysine on mica - Electrokinetic characteristics", *J. Colloid Interface Sci.*, 456 (2015) 116-124
48. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska, M.Sadowska "Revealing fibrinogen monolayer conformations at different pHs: Electrokinetic and colloid deposition studies", *J. Colloid Interface Sci.*, 449 (2015) 62-71

49. J.Nowicki, Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Synthesis of Novel Perfluoroalkylglucosides on Zeolite and Non-Zeolite Catalysts", *Molecules*, 20 (2015) 6140-6152
50. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Adsorption of tannic acid on polyelectrolyte monolayers determined in situ by streaming potential measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 438 (2015) 249-258
51. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "pH-Controlled desorption of silver nanoparticles from monolayers deposited on PAH-covered mica", *J. Nanoparticle Res.*, 17 (2015) 235
52. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, K.Kubiak "Influence of supporting polyelectrolyte layers on the coverage and stability of silver nanoparticle coatings", *J. Colloid Interface Sci.*, 445 (2015) 205-212
53. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, K.Kubiak "Silver particle monolayers - formation, stability, applications", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 222 (2015) 530-563
54. M.Oćwieja, A.Popov, Z.Adamczyk, M.Morga, A.Ramanaviciene, A.Ramanavicius "Deposition of silver nanoparticles from suspensions containing tannic acid", *Colloid Surf. A*, 477 (2015) 70-76
55. L.R.Offermann, M.Bublin, M.L.Perdue, S.Pfeifer, P.Dubiela, T.Borowski, M.Chruszcz, K.Hoffmann-Sommergruber "Structure and functional characterization of the hazelnut allergen Cor a 8", *J. Agric. Food Chem.*, 63 (2015) 9150-9158
56. A.Olejniczak, M.Lezańska, A.Pacula, P.Nowak, J.Wloch, J.P.Łukaszewicz "Nitrogen-containing mesoporous carbons with high capacitive properties derived from a gelatin biomolecule", *Carbon*, 91 (2015) 200-214
57. Ł.Orzeł, B.Szmyd, D.Rutkowska-Żbik, L.Fiedor, R.van Eldik, G.Stochel "Fine tuning of copper(II)–chlorophyll interactions in organic media. Metalation versus oxidation of the macrocycle", *Dalton Trans.*, 44 (2015) 6012-6022
58. M.Oszajca, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Crystal Structures of 1,8-bis(dimethylamino)naphthalene (DMAN) and Dicarboxylic Acids Complexes Determined from Single-crystal and Powder Diffraction Data", *Cryst. Res. Technol.*, 50 (2015) 781-790
59. A.Pacula, P.Nowak, W.Makowski, R.P.Socha "The influence of layered double hydroxide composition on the morphology, porosity and capacitive properties of nitrogen-doped carbon materials prepared via chemical vapor deposition", *Microporous Mesoporous Mater.*, 201 (2015) 1-9
60. A.Pacula, K.Pamin, J.Kryściak-Czerwenka, Z.Olejniczak, B.Gil, E.Bielańska, R.Dula, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz "Physicochemical and catalytic properties of hybrid catalysts derived from 12-molybdophosphoric acid and montmorillonites", *Appl. Catal. A*, 498 (2015) 192-204
61. P.Paluch, T.Pawlak, M.Oszajca, W.Łasocha, M.J.Potrzebowski "Fine Refinement of Solid State Structure of Racemic Form of Phospho-tyrosine Employing NMR Crystallography Approach", *Solid State Nucl. Magn. Res.*, 65 (2015) 2-11

62. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, S.Basąg, J.Maciejewska, J.Kryściak-Czerwenka, R.Tokarz-Sobieraj "Hydroxylation of phenol by hydrogen peroxide catalyzed by heteropoly compounds in presence of glycerol as green solvent", *Catal. Today*, 257 (2015) 80-85
63. K.Pamin, M.Prończuk, S.Basąg, W.Kubiak, Z.Sojka, J.Połtowicz "A new hybrid porphyrin-heteropolyacid material: synthesis, characterization and investigation as catalyst in Baeyer-Villiger oxidation. Synergistic effect", *Inorg. Chem. Commun.*, 59 (2015) 13-16
64. T.Pańczyk, Ł.Kończak, S.Zapotoczny, M.Szabelski, M.Nowakowska "Molecular dynamics simulations of proton transverse relaxation times in suspension of magnetic nanoparticles", *J. Colloid Interface Sci.*, 437 (2015) 187-196
65. T.Pańczyk, P.Wolski, Ł.Konczak, J.Narkiewicz-Michalek "Sidewall Functionalization of Carbon Nanotubes as a Method of Controlling Structural Transformations of the Magnetically Triggered Nanocontainer: A Molecular Dynamics Study", *J. Phys. Chem. C*, 119 (2015) 8373-8381
66. E.Pięta, E.Proniewicz, B.Boduszek, T.K.Olszewski, M.Nattich-Rak, Y.Kim "Probing the Ag, Au, and Cu electrode/pyridine- $\alpha$ -hydroxymethyl biphenyl phosphine oxide isomer interface with SERS", *Appl. Surf. Sci.*, 335 (2015) 167-183
67. M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, W.Lasoń, P.Warszyński "Polyelectrolyte-coated nanocapsules containing undecylenic acid: synthesis, biocompatibility and neuroprotective properties", *Colloids Surf. B*, 135 (2015) 8-17
68. A.Łazińska, W.Łaziński, K.Jóźwiak "Agonist binding by  $\beta$ -2-adrenergic receptor: an influence of the receptor conformation on the ligand association/dissociation characteristics", *Eur. Biophys. J.*, 44 (2015) 149-63
69. W.Łaziński, A.Łazińska, M.Drach "The water-catalyzed mechanism of the ring-opening reaction of glucose", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17 (2015) 21622-21629
70. W.Łaziński, M.Drach "Binding of bivalent metal cations by  $\alpha$ -L-gulonate: insights from the DFT-MD simulations", *New J. Chem.*, 39 (2015) 3987-3994
71. W.Łaziński, M.Drach "The influence of the hexopyranose ring geometry on the conformation of glycosidic linkages investigated using molecular dynamics simulations", *Carbohydr. Res.*, 415 (2015) 17-27
72. W.Łaziński, M.Drach "Kinetic characteristics of conformational changes in the hexopyranose rings", *Carbohydr. Res.*, 416 (2015) 41-50
73. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, D.Sarkowicz, W.Łasocha "The Use of XRPD for the Investigation of Historic Pigments and Painting Materials in Works by Henryk Siemiradzki", *J. Anal. Atomic Spectr.*, 30 (2015) 751-758
74. F.J.M.Ruiz-Cabello, M.Moazzami-Gudarzi, M.Elżbieciak-Wodka, P.Maroni, C.Labbez, M.Borkovec, G.Trefalt "Long-Ranged and Soft Interactions between Charged Colloidal Particles Induced by Multivalent Coions", *Soft Matter*, 11 (2015) 1562-1571

75. K.Samson, A.Żelazny, R.Grabowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk, M.Śliwa, K.Pamin, A.Kornas, M.Lachowska "Influence of the carrier and composition of active phase on physicochemical and catalytic properties of CuAg/ oxide catalysts for selective hydrogenolysis of glycerol"; *Res. Chem. Intermed*, 41 (2015) 9295-9306
76. N.Spiridis, M.Zajac, P.Piekarz, A.I.Chumakov, K.Freindl, J.Goniakowski, A.Kozioł-Rachwał, K.Parliński, M.Ślęzak, T.Ślęzak, U.D.Wdowik, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "Phonons in Ultrathin Oxide Films: 2D to 3D Transition in FeO on Pt(111)", *Phys. Rev. Lett.*, 115 (2015) 186102
77. V.Starinieri, D.C.Hughes, D.Wilk "Influence of substrate and sand characteristics on Roman cement mortar performance", *Constr. Building Mater.*, 91 (2015) 274-287
78. Z.Starowicz, M.Lipiński, R.P.Socha, K.Berent, G.Kulesza, P.Ozga "Photochemical silver nanoparticles deposition on sol-gel TiO<sub>2</sub> for plasmonic properties utilization", *J. Sol-Gel Sci. Technol.*, 73 (2015) 563-571
79. M.Stec, R.Szatanek, M.Baj-Krzyworzeka, J.Baran, M.Zembala, J.Barbasz, A.Waligórska, J.W.Dobrucki, B.Mytar, A.Szczepanik, M.Siedlar, G.Drabik, B.Urbanowicz, M.Zembala "Interactions of tumour-derived micro (nano) vesicles with human gastric cancer cells", *J. Translational Medicine*, 13 (2015) 376
80. M.Stec, M.Baj-Krzyworzeka, J.Baran, K.Węglarczyk, M.Zembala, J.Barbasz, A.Szczepanik, M.Zembala "Isolation and characterization of circulating micro (nano) vesicles in the plasma of colorectal cancer patients and their interactions with tumor cells", *Oncology Reports*, 34 (2015) 2768-2775
81. B.Sulikowski "Solid-state <sup>29</sup>Si and <sup>27</sup>Al NMR studies of natural mesolite", *Microporous Mesoporous Mater.*, 206 (2015) 144-149
82. K.Szczepanowicz, U.Bazylińska, J.Pietkiewicz, L.Szyk-Warszyńska, K.A.Wilk, P.Warszyński "Biocompatible long-sustained release oil-core polyelectrolyte nanocarriers: From controlling physical state and stability to biological impact", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 222 (2015) 678-691
83. K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Magnetically responsive liquid core polyelectrolyte nanocapsules", *J. Microencapsulation*, 32 (2015) 123-128
84. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, M.Zajac, A.Kozioł-Rachwał, R.P.Socha, M.Stankiewicz, P.Warnicke, N.Pilet, J.Raabe, C.Quitmann, J.Korecki "Prospects of X-ray photoemission electron microscopy at the first beamline of the Polish synchrotron facility 'Solaris'", *X-Ray Spectr.*, 44 (2015) 317-322
85. M.Tatko, M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, A.Kędra, E.Bieleńska "Composite cathode materials Sm<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>-La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>FeO<sub>3</sub> for solid oxide fuel cells", *Solid State Ionics*, 271 (2015) 103-108
86. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, P.Niemiec, A.Kirpsza, M.Witko "Generation of acidic sites in Al., Ga, In salts of molybdenum and tungsten Keggin-type heteropolyacids. DFT modeling and catalytic tests", *Catal. Today*, 257 (2015) 72-79

87. D.Wiśnios, A.Kiejna, J.Korecki "First-principles study of the adsorption of MgO molecules on a clean Fe(001) surface", *Phys. Rev. B*, 92 (2015) 5425-5425
88. M.Włodek, M.Kolasinska-Sojka, M.Szuwarzyński, S.Zapotoczny, P.Warszyński "Formation and characterization of (1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine)/(1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phospho-L-serine) supported lipid bilayers on polyelectrolyte multilayer films", *Thin Solid Films* 592 (2015) 1–7
89. M.Włodek, M.Szuwarzyński, M.Kolasinska-Sojka "Effect of supporting polyelectrolyte multilayers and deposition conditions on the formation of 1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine/-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphoethanolamine lipid bilayers", *Langmuir*, 31(2015) 10484-10492
90. M.Wojnicki, M.Luty-Błocho, R.P.Socha, K.Mech, Z.Pędzich, K.Fitzner, E.Rudnik "Kinetic studies of sorption and reduction of gold(III) chloride complex ions on activated carbon Norit ROX 0.8", *J. Ind. Eng. Chem.*, 29 (2015) 289-297
91. X.Wu, P.Sten, S.Engblom, P.Nowak, P.Österholm, M.Dopson "Impact of mitigation strategies on acid sulfate soil chemistry and microbial community", *Sci. Total Environ.*, 526 (2015) 215-221
92. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Formation and influence of the dynamic adsorption layer on kinetics of the rising bubble collisions with solution/gas and solution/solid interfaces", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 222 (2015) 765-778
93. J.Zawała, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Theoretical and experimental studies of drop size in membrane emulsification - Single pore studies of hydrodynamic detachment of droplets", *Colloid Surf. A*, 470 (2015) 297-305
94. W.Zieliński, K.A.Wilk, G.Para, E.Jarek, K.Ciszewski, J.Palus, P.Warszyński "Synthesis, surface activity and antielectrostatic properties of new soft dichain cationic surfactants", *Colloid Surf. A*, 480 (2015) 63-70

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

1. T.Czeppe, E.Korznikova, P.Ozga, L.Lityńska-Dobrzyńska, R.P.Socha "Application of the high pressure torsion supported by mechanical alloying for the metal-graphene composites preparation", *Mechanik*, (02) (2015) 147-157, DOI: 10.17814/mechanik.2015.2.84
2. A.Kędra, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Lipiński, K.Łaba, P.Warszyński "Wykorzystanie efektu plazmonowego na cząstkach metali do wzbudzenia emisji w konwerterach światła", *Elektronika*, 8 (2015) 25-26
3. A.Maciej, W.Simka, T.Gorewoda, M.Kubiczek, R.Socha, G.Dercz "Badania składu chemicznego i fazowego anodowo utlenianych powłok stopowych Zn-Ni", *Ochrona przed Korozją*, 58 (2015) 180-184
4. M.Mosiąlek, M.Krzan, M.Tatko, E.Bieleńska, A.Kędra, A.Michna, E.Czerlunczakiewicz "Composite cathode materials for solid oxide fuel cells", *Materiały Ceramiczne / Ceramic Materials*, 67 (2015) 220-221

5. P.Nowak, M.Mosiąlek, G.Nawrat "Corrosion of magnesium and its alloys - new observations and ideas", *Ochrona przed korozją*, 58 (2015) 371-377
6. M.Ryś, M.Szaleniec, A.Skoczowski, I.Stawoska, A.Janeczko "FT-Raman spectroscopy as a tool in evaluation the response of plants to drought stress", *Open Chem.*, 13 (2015) 1091-1100
7. J.Zawała, P.Zawała, K.Małyś "On mechanism of the bubble bouncing from hydrophilic and hydrophobic surfaces", *Annales UMCS, sectio AA, Chemia*, 70 (2015) 15-27

#### **PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY EUROPEAN REFERENCE INDEX FOR THE HUMANITIES (LISTA C)**

1. M.Wołoszyn, E.M.Nosek, J.Stępiński, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha, E.Bieleńska "The seals from Czeremno (Cherven Townes, Eastern Poland) - chemical analysis and metallurgical examination", *Archeologia Polski*, 60 (2015) 123-152

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

1. A.Brątek-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Human Fibrinogen Monolayers under Aqueous Conditions", *FEBS J.*, 282 (2015) (Suppl. 1) 335-336
2. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Experimental and Theoretical Methods as a Tool for the Interpretation of Lysozyme Immobilization at a Silica Surface", *FEBS J.*, 282 (Suppl. 1) (2015)
3. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrogen and oxygen reaction on SiO<sub>2</sub> and MoO<sub>3</sub> supported Pd-Pt catalysts", *Recycl. Catal.*, 2 (2015) 27-35
4. M.Łapczyńska, M.Piotrowski, D.Jantas, P.Warszyński, K.Szczepanowicz "Synthesis of the PCL nanoparticles containing neuroprotectants as efficient (brain) drug delivery systems", *FEBS J.*, 282 (Suppl. 1) (2015) 182
5. K.Podgorna, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, P.Warszyński „Magnetically responsive polyelectrolyte nanocapsules as carriers of therapeutic compounds”, *FEBS J.*, 282 (Suppl. 1) (2015) 264
6. A.Rugor, A.Bojarski, M.Szaleniec "A unique bacterial molybdoenzyme - from structural insights to industrial application", *PAS Annual Report*, (2015) 46-48 [ISSN 1640-3754]
7. D.Rutkowska-Żbik "Project NanoEIS: Nanotechnology Education for Industry and Society", *EC2E2N NewsLetter*, 16(1) (2015) pp.6 [ISSN 2309-5911]
8. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska "Revealing human Fb monolayer conformations at different pHs", *FEBS J.*, 282 (Suppl. 1) (2015) 208
9. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of nanoparticle deposition on polystyrene latex particles revealed by electrokinetic, AFM and SEM measurements", *FEBS J.*, 282 (Suppl. 1) (2015) 207-208

10. K.Sofińska, Z.Adamczyk "Quantitative adsorption of IgG on colloidal particles as a new method for preparation of low-cost immunoassays", FEBS J., 282 (Suppl. 1) (2015) 350
11. K.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules as a drug carrier for targeted cancer therapy", FEBS J., 282 (Suppl. 1) (2015) 262
12. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Understanding the mechanism of dendrimers adsorption onto oppositely charged surfaces using surface plasmon resonance and quartz crystal microbalance techniques", FEBS J., 282 (2015) (Suppl. 1) 245
13. J.Yu, K.Zurcher, G.Schlottig, M.Baum, M.M.Visser Taklo, B.Wunderle, P.Warszyński, T.Brunschwiler "Nanoparticle assembly and sintering towards all-copper flip chip interconnects", IEEE Conference Publications 2015 IEEE 65<sup>th</sup> Electronic Components and Technology Conf. (IEEE-ECTC), San Diego 2015, p.1115-1121
14. J.Zurcher, C.Xi, B.R.Burg, S.Zimmermann, T.Brunschwiler, H.Guo, A.R.Studart, G.Potasiewicz, P.Warszyński "Enhanced thermal underfills by bridging nanoparticle assemblies in percolating microparticle beds", IEEE Conference Publications 2015 IEEE 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology (IEEE-NANO), Rome 2015, p.577-580
15. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Revealing adsorption mechanism of human fibrinogen on positively charge latex", FEBS J., 282 (Suppl 1) (2015) 330

#### **Publikacje ogłoszone w formie elektronicznej**

1. Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas, D.Lupa "Oxidative dissolution of silver nanoparticles: A new theoretical approach", J. Colloid Interface Sci., 12/2015; DOI:10.1016/j.jcis.2015.12.051 (in press)
2. A.Barbasz, M.Oćwieja "Gold nanoparticles and ions - friends or foes? As they are seen by human cells U-937 and HL-60", J. Exp. Nanosci., 2015, DOI:10.1080/17458080.2015.1096024 (in press)
3. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Williams, S.P.Armes "Streaming potential studies of the adsorption of fluorescently-labeled poly (ethylene imine) onto mica", Colloids Surf. A, (2015), DOI:10.1016/j.colsurfa.2015.12.019 (in press)
4. E.Niedziałkowska, O.Gąsiorowska, K.B.Handing, K.A.Majorek, P.J.Porębski, I.G.Shabalin, E.Zasadzińska, M.Cymborowski, W.Minor "Protein purification and crystallization artifacts: The tale usually not told". Protein Sci., 2015 DOI: 10.1002/pro.2861. (in print)
5. M.Quesne, T.Borowski, S.de Visser "Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Modeling of Enzymatic Processes: Caveats and Breakthroughs", Chem. Eur. J., (in print)
6. A.Stępniewski, M.Radoń, K.Góra-Marek, E.Broclawik "Ammonia-modified Co(II) sites in zeolites: spin and electron density redistribution through the Co<sup>II</sup>-NO bond", Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, DOI: 10.1039/C5CP07452E (in print)
7. J.Zawała "Energy balance in viscous liquid containing a bubble: rise due to buoyancy", Can. J. Chem. Eng., (2015) DOI: 10.1002/cjce.22420 (in print)

8. J.Zawała, D.Kosior, T.Dąbroś, K.Małyś "Influence of bubblesurfacefluidity on collisionkinetics and attachment to hydrophobicsolids", *Colloids Surf. A*, (2016) 10.1016/j.colsurfa.2015.12.023 (in print)

## **PUBLIKACJE Z ROKIEM WYDANIA 2016**

1. A.Dziedzicka, B.Sulikowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Catalytic and physicochemical properties of modified natural clinoptilolite", *Catal. Today*, 259 (2016) 50-58
2. B.Jachimska, K.Tokarczyk, M.Łapczyńska, A.Puciul-Malinowska, Sz.Zapotoczny "Structure of bovine serum albumin adsorbed on silica investigated by quartz crystal microbalance", *Colloids Surf. A*, 489 (2016) 163-172
3. T.Kruk, K.Szczepanowicz, D.Kręgiel, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Nanostructured multilayer polyelectrolyte films with silver nanoparticles as antibacterial coatings", *Colloid Surf. B*, 137 (2016) 158-166
4. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Cieśla "Fibrinogen adsorption mechanisms at the gold substrate revealed by QCM-D measurements and RSA modeling", *Colloids Surf. B*, 139 (2016) 123-131
5. S.Łukasiewicz, K.Szczepanowicz, K.Podgorna, E.Błasiak, N.Majeed, S.Ogren, W.Nowak, P.Warszyński, M.Dziedzicka-Wasylewska "Encapsulation of Clozapine in polymeric nanocapsules and its biological effects", *Colloids Surfaces B*, 140, (2016) 342-352
6. D.Majda, A.Korzeniowska, W.Makowski, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes for characterization of mesoporous SBA-15 silicas - Refinement of methodology", *Microporous Mesoporous Mater.*, 222 (2016) 33-43
7. D.Majda, K.Tarach, K.Góra-Marek, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes for characterization of mesoporous SBA-15 silicas – Towards deeper understanding the effect of the probe liquid nature", *Microporous Mesoporous Mater.*, 226 (2016) 25-33
8. A.Mleczkowska, M.Strojecki, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Particle penetration and deposition inside historical churches", *Building Environ.*, 95 (2016) 291-298, DOI: 10.1016/j.buildenv.2015.09.017
9. M. Nattich-Rak, Z. Adamczyk, M. Kujda, "Revealing Deposition Mechanism of Colloid Particles on Human Serum Albumin Monolayers", *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 137 (2016) 176-182
10. J.Olszówka, R.Karcz, B.Napruszewska, E.Bieleńska, R.Dula, M.Krzan, M.Nattich-Rak, R.P.Socha, A.Klimek, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Magnesium and/or calcium - containing natural minerals as ecologically friendly catalysts for the Baeyer-Villiger oxidation of cyclohexanone with hydrogen peroxide", *Appl. Catal. A*, 509 (2016) 52-65
11. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Hydrolysis driven surface activity of esterquat surfactants", *J. Colloid Interface Sci.*, 465 (2016) 174-182

12. W. Płaziński, A. Lonardi, P.H. Hünenberger "Revision of the GROMOS 56A6CARBO force field for hexopyranose-based carbohydrates: improving the description of ring-conformational equilibria in oligo- and polysaccharide chains", *J. Comp. Chem.*, 37, (2016) 354–365
13. J. Radivojevic, S. Skaro, L. Senerovic, B. Vasiljevic, M. Guzik, S.T. Kenny, V. Maslak V, J. Nikodinovic-Runic, K.E. O'Connor "Polyhydroxyalkanoate-based 3-hydroxyoctanoic acid and its derivatives as a platform of bioactive compounds", *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 100 (2016) 161-172 DOI: 10.1007/s00253-015-6984-4
14. K. Sofińska, Z. Adamczyk, J. Barbasz, "Mechanism of immunoglobulin G adsorption on polystyrene microspheres", *Colloids Surf. B*, 137 (2016) 183-190
15. M. Tatko, M. Mosialek, A. Kędra, E. Bielańska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, P. Nowak "Thermal shock resistant composite cathode material  $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_{3-\delta}$ – $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{FeO}_{3-\delta}$  for solid oxide fuel cells", *J. Solid State Electrochem.*, 20 (2016) 143-151
16. J. Zawała, D. Kosior "Dynamics of dewetting and bubble attachment to rough hydrophobic surfaces - measurements and modelling", *Minerals Eng.*, 85 (2016) 112-122

## STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Z. Adamczyk "Protein Adsorption – a True Story", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015, p.18
2. Z. Adamczyk "Mechanisms of Nanoparticle Deposition and Stability of Their Monolayers", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015, p.11
3. Z. Adamczyk "Mechanizmy zjawisk adsorpcji i osadzania z fazy ciekłej na powierzchniach stałych", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.1
4. Z. Adamczyk "Biomimetic calcium phosphate mineralization - focus on surfaces and interfaces", Book of Abstracts. Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
5. D. Babilas, E. Urbańczyk, M. Sowa, A. Maciej, D.M. Korotin, I.S. Zhidkov, K. Szymańska, K. Suchanek, M. Basiaga, M. Krok-Borkowicz, L. Szyk-Warszyńska, E. Pamuła, E.Z. Kurmaev, S.O. Cholakh, W. Simka "Influence of Electropolishing and Anodic Oxidation of Ti15Mo Alloy on Surface Conditions and Corrosion Resistance", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.64 [ISBN 978-83-60514-23-8]
6. A. Barbasz, B. Kreczmer, M. Oćwieja "The effects of exposure of calli cells of two wheat varieties to silver nanoparticles and silver ions", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Int. Conf. 'Plant Functioning under Environmental Stress', Krakow 2015
7. P. Batys, M. Nosek, P. Weroński "Analiza struktury wielowarstw cząstek koloidalnych", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.10

8. P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Role of single water molecule in cholesterol condensation effect", Book of Abstracts. 2015 Martini Coarse-Graining Workshop, Groningen 2015
9. P.Batys, P.Weroński, M.Nosek "Synteza i charakterystyka struktury quasi-heksagonalnych monowarstw", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.12
10. D.Bialek-Kostecka, Z.Kaszowska, E.Jarek, M.Kot, J.Bagniuk, A.Sajdak "Wpływ spoiw syntetycznych użytych w procesie utrwalania malowideł ściennych na właściwości warstw malarskich", Mater. 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ'15', Warszawa 2015
11. B.Bożek, M.Oszajca, W.Łasocha "Syntezy nowych molibdenianów", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]
12. A.Brateg-Skickia, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Systematic Study of Human Fibrinogen Adsorption on Negatively Charged Colloidal Particles", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, p.13-14
13. A.Brateg-Skicki, P.Żeliszewska, M.Cieśla, Z.Adamczyk "Określenie mechanizmu adsorpcji fibrynogenu na nośnikach koloidalnych", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.16
14. E.Broclawik, A.Stępniewski, M.Radoń, K.Góra-Marek "Cobalt sites in zeolites: spin state as the gate controlling charge transfer channels", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015, p.39-40 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
15. D.Connell, B.Jachimska, V.A.Ferro, P.Mulheran, "Physicochemical characterisation and analysis of peptide adsorption onto inorganic surfaces", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015 [ISBN 978-83-60514-22-1]
16. D.Connell, P.Mulheran, V.Ferro, B.Jachimska "Physicochemical characterization and analysis of peptide adsorption onto inorganic surfaces for use in immunotherapies", Mater. Surface Science Day, Preston 2015
17. D.Connell, B.Jachimska, V.A.Ferro, P.Mulheran "Development of a Potential Immunocontraceptive Nanomaterial Using Molecular Dynamics Simulations", Mater. Research Presentation Day, Glasgow 2015
18. J.Cybulska, A.Brzyska, A.Zdunek, K.Woliński "Simulations of enforced structural changes in galacturonic acid molecules", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015 [ISBN 978-83-60988-20-6]
19. M.Ćwięka, B.Jachimska "Nondestructive Characterization of Lysozyme Layers on Silica Surface using MP-Surface Plasmon Resonance and Quartz Crystal Microbalance", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
20. M.Ćwięka, B.Jachimska "The effect of the solution pH on the lysozyme immobilization at the gold surface", 15th European Student Colloid Conference, 08-11.06.2015, Kraków

21. M.Ćwięka, B.Jachimska "Efektywność adsorpcji lizozymu(LSZ) na powierzchni złota", Mater. 5.V Konf. Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2015
22. M.Ćwięka, B.Jachimska "Effective Immobilization of Biological Catalyst: Lysozyme on gold surface", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.207 [ISBN 978-83-60514-22-1]
23. M.Ćwięka, B.Jachimska "LSZ adsorption on silica surface using the QCM-D and MP-SPR", Mater. Erasmus+ (KA1 – Mobilność edukacyjna) Meeting, Kraków 2015
24. M.Ćwięka, B.Jachimska "Interaction of lysozyme with silica surface: molecular rearrangements", Mater. Konf. 'Horyzonty Nauki: Giełda Prac Dyplomowych', Kraków 2015
25. M.Dobrzański, T.Ślęzak, M.Zajac, I.Miotkowski, J.Korecki, N.Spiridis, D.G.Merkel, M.Sikora, M.Waśniowska, Z.Kąkol, Z.Tarnawski, A.Kozłowski "Nuclear inelastic scattering and nuclear forward scattering studies of 57Fe adatoms dynamics and magnetism on top of topological insulator Bi2Se3", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.315 [ISBN 978-83-62079-22-3]
26. K.Drabczyk, R.P.Socha, G.Mordarski, A.Skwarek, "Investigation of the Copper Deposition on Screen Printed Front Electrode of Solar Cell", Book of Abstracts. 38<sup>th</sup> Int. Spring Seminar on Electronics Technology ISSE 201 'Novel Trends in Electronics Manufacturing', Eger 2015, A13
27. A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Kosydar, W.Rojek, T.Szumelda, M.Kołodziej, E.Bieleńska "Pasywne autokatalityczne rekombinatory wodoru; idea, wady, zalety", Materiały. Konf. 'Wybrane aspekty bezpieczeństwa elektrowni jądrowej w Polsce', Mądralin 2015
28. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Insight into Cpd II oxidation ability towards aldehydes: energetic pathways and ligand effect", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p340 [ISBN 978-83-60514-22-1]
29. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Oxidation of alcohols and aldehydes by Compound II mimics - energetic pathways and ligand effect", Book of Abstracts. 17<sup>th</sup> Int. Symp.on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, Utrecht 2015, p.187
30. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Insight into CpdII oxidation ability towards alcohols and aldehydes – mechanism and ligand effect", Proceedings. 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015, p.87-88 [ISBN 978-83-7784-669-8]
31. A.Dudzik, A.Rugor, M.Tataruch, M.Szaleniec "Optimization of catalytic synthesis of hydroxylated cholesterol derivatives by steroid C25 dehydrogenase", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.208 [ISBN 978-83-60514-22-1]

32. R.Dula, B.Napruszewska, D.Mucha, E.Bielańska, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Destrukcyjna struktura hydrotalkitów Mn-Al w czasie składowania - wpływ na właściwości mieszanych tlenków otrzymanych w wyniku kalcynacji", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.244 [ISBN 978-83-60514-22-1]
33. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Socha "Uwodornienie acetolu w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury w obecności katalizatorów rutenowych naniesionych na mezoporowatą krzemionkę typu SBA-15", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.94 [ISBN 978-83-60514-22-1]
34. K.Durczyk, B.Sulikowski "Ultrastabilny zeolit typu Y: otrzymywanie i właściwości katalityczne w transformacjach  $\alpha$ -pinenu", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.96-97 [ISBN 978-83-60514-22-1]
35. K.Durczyk, B.Sulikowski "Physicochemical and catalytic properties of ultrastable zeolite Y specimens", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015, p.89-90 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
36. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Catalytic and physicochemical properties of modified natural clinoptilolite specimens", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015, p.93-94 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
37. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Izomeryzacja  $\alpha$ -pinenu na modyfikowanym naturalnym klinoptylolicie", , Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.98 [ISBN 978-83-60514-22-1]
38. M.Elżbieciak-Wodka, K.Kilan, T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, K.Podgórna, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, "Nanostructured Materials Based On Polyelectrolyte Multilayers", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sandomie 2015, p.48
39. M.Elżbieciak-Wodka, M.Kolasińska-Sojka, P.Nowak, P.Warszyński "Tuning the permeability and thickness properties of polyelectrolyte multilayer films: linear vs. exponential growth", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.84 [ISBN 978-83-60514-23-8]
40. K.Freindl, M.Zajac, N.Spiridis, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "Oxygen adsorption on Fe(110) revisited", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> European Conf. on Surface Crystallography and Dynamics, Trieste 2015, p.62
41. M.Gackowski, S.Belkhaïr, L.Tosheva "Influence of crystal size and mesoporosity on antibacterial properties of Ag-exchanged zeolites", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.325 [ISBN 978-83-60514-22-1]
42. M.Gackowski, E.Bielańska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, M.Derewinski "Deposition of zeolite nanoparticles onto porous silica monolith", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.247-248 [ISBN 978-83-60514-22-1]

43. M.Gackowski, K.Onik, Ł.Kuterasiński, A.Dziedzicka, K.Durczyk, J.Podobiński, B.Sulikowski, M.Derewiński "Protozeolitic clusters embedded into layered and macroporous structures as catalysts for the liquid phase reactions", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015, p.65-66 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
44. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Silica monolith with deposited nanoparticles of zeolites", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Int. Conf. on Materials Chemistry, York 2015
45. E.I.García-López, G.Marcì, F.R.Pomilla, L.Palmisano, A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka "Comparison between catalytic and photocatalytic activity in gas-solid regime of semiconductor oxides and carbon nanotubes supported Keggin heteropolyacid", Book of Abstracts. 21<sup>st</sup> Int. Symp. on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds, Krakow 2015, p.SC13.
46. K.Gołabek, A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero, K.Pamin, A.Kornas, K.Góra-Marek "Ag-Cu/M<sub>x</sub>O<sub>y</sub> catalysts for selective glycerol hydrogenolysis: role of the catalysts composition and reaction conditions", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015, p.97 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
47. A.Gonzalez Giellen, K.Luberda-Durnaś, M.Oszajca, W.Łasocha "Hybrid Organic-Inorganic Material ZnS(p-Xylylnadamine)1/2", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]
48. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, B.Dembińska, P.J.Kulesza, E.Bielańska, M.Ruggiero "The effect of Nafion ionomer on electroactivity of palladium – polypyrrole catalysts for the oxygen reduction reaction", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.99-100 [ISBN 978-83-60514-22-1]
49. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, B.Dembińska, P.J.Kulesza, E.Bielańska, M.Ruggiero "The effect of Nafion ionomer on electroactivity of palladium – polypyrrole catalysts for the oxygen reduction reaction", Programme. 66<sup>th</sup> Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Taipei 2015, Int. Soc. of Electrochemistry, Lausanne 2015, p.104
50. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "DFT study of Cr, Mo and W oxide monomers supported on silica", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015 [ISBN 978-83-60988-20-6]
51. J.Gurgul, E.Młyńczak, A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, T.Ślęzak, J.Korecki "Coercivity enhancement in CoO/Fe bilayer system", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.379 [ISBN 978-83-62079-22-3]
52. J.Gurgul, M.Zimowska, K.Łątka, D.B.Napruszewska, R.P.Socha "<sup>57</sup>Fe Mössbauer spectroscopy studies of the nature and environment of iron species in porous clay heterostructures", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015, P2-NM-16

53. J.Heider, M.Szaleniec "Oxygen-independent hydrocarbon hydroxylation reactions by molybdenum enzymes: ethylbenzene dehydrogenase and family", Book of Abstracts. 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015, p.16
54. B.Jachimska, M.Ćwięka, S.Świątek, K.Tokarczyk "Structure and Properties of Protein Layers: From Biomolecules to a Functional Surface", Book of Abstracts. 23<sup>rd</sup> Int. Symp.on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Malmö 2015
55. B.Jachimska, K.Tokarczyk "Immobilization of PAMAM dendrimers on solid support", Book of Abstracts. 23<sup>rd</sup> Int. Symp.on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Malmö 2015
56. K.Jóźwiak, K.Pająk, A.Płazińska, W.Płaziński, I.Wainer "Molecular mechanisms of functional selectivity of fenoterol derivatives towards the  $\beta_2$ -adrenergic receptor", Book of Abstracts. 26<sup>th</sup> Int. Symp. on Pharmaceutical and Biomedical Analysis", Tbilisi 2015
57. R.Karcz, P.Klein, V.Pashkova, S.Sklenak, J.Dedecek "Dystrybucja atomów glinu w sieci krystalicznej zeolitu TNU-9", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.257 [ISBN 978-83-60514-22-1]
58. A.Kędra, R.P.Socha, J.Gurgul, Z.Starowicz, M.Lipiński, S.M.Hanetho, P.Dahl, T.Kruk, K.Łaba, K.Łątka, P.Warszyński "Wykorzystanie efektu plazmonowego na cząstkach metali do wzbudzenia emisji w konwerterach światła", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.25
59. A.Kędra, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Zimowska, K.Szczepanowicz, Z.Starowicz, M.Lipiński, K.Łaba, P.Warszyński "Emission of light converters excited by plasmonic particles", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Congr. of Energy Efficiency and Energy Related Materials ENEFM2015, Oludeniz 2015, p.84
60. A.Kędra, R.P.Socha, M.Zimowska, L.Szyk-Warszyńska, P.Panek, J.Barbasz, P.Warszyński "Comparison of metallic and bimetallic catalysts for silicon surface texturization", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.112 [ISBN 978-83-60514-22-1]
61. A.Kędra, P.Warszyński, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, J.Gurgul, K. zczepanowicz, M.Zimowska, M.Lipiński, S.M.Hanetho, P.Dahl "Synteza i charakteryzacja konwerterów światła opartych na strukturze perowskitu", Materiały. 6. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika', Świeradów-Zdrój 2015
62. A.Kirpsza, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, E.Lalik "Weryfikacja użyteczności reakcji konwersji alkoholi jako reakcji modelowych do oznaczania kwasowości katalizatorów stałych", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.114-115 [ISBN 978-83-60514-22-1]
63. A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka "Synteza diizopropylowego eteru DIPE w układach heteropolikwas typu Keggina-nośnik tlenkowy", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.75-76 [ISBN 978-83-60514-22-1]

64. H.W.Klemm, G.Peschel, E.Madej, A.Fuhrich, M.Timm, T.Schmidt, H.-J.Freund "Growth of ultrathin Silica Films on Ru(0001)", Book of Abstracts. 79th Annual Meeting of DPG and DPG-Fruhjahrstagung of the Condensed Matter Section, Berlin 2015, p.416
65. M.Kołodziej, R.Kosydar, E.Lalik, T.Szumelda, D.Duraczyńska, J.Gurgul, M.Ruggiero, A.Drelinkiewicz "Rola brązów  $H_xMoO_3$  i  $H_yWO_3$  w selektywności uwodorniania  $C=O/C=C$  w aldehydach nienasyconych na katalizatorach Pd", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.119 [ISBN 978-83-60514-22-1]
66. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Sidewall Functionalization of Magnetically Triggered Nanocontainer by Colloid Nanoparticles and Amide Groups. A Molecular Dynamics Study", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
67. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Sidewall functionalization of carbon nanotubes as a method of controlling structural transformations of the magnetically triggered nanocontainer. A molecular dynamics study", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes NT15, Nagoya 2015
68. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Interaction of Carbon Nanotube with Gold Nanoparticles Covered by pH-cleavable Hydrazone Linkers. Molecular Dynamics Study", Proceedings. 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015 [ISBN 978-83-7784-669-8]
69. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Computational study of a nanocontainer composed of carbon nanotube and gold nanoparticles covered by pH-cleavable hydrazone linkers", Book of Abstracts. 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
70. J.Korecki "Spektro-mikroskopia z użyciem miękkiego promieniowania X w 'Solaris'", Program i streszczenia. 43. Zjazd Fizyków Polskich, Kielce 2005, p.259 [ISBN 978-83-85953-13-5]
71. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Ruggiero, A.Żelazny, M.Śliwa "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne katalizatorów miedziowych w reakcji uwodornienia  $CO_2$  w kierunku eteru dwumetylowego (DME)", in; "Badania i Rozwój Młodych Naukowców w Polsce 2015 - Materiały konferencyjne", Wrocław 2015, Wydawnictwo Młodzi Naukowcy, Poznań 2015, P.2, p.40 [ISBN 978-83-942083-3-2]
72. A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Oddziaływanie małego klastra miedzi z cząsteczkami wodoru – obliczenia DFT", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.220 [ISBN 978-83-60514-22-1]
73. D.Kosior, J.Zawała, A.Niecikowska, K.Małyś "Influence of surfactant polar group on the colliding bubble attachment to hydrophilic and hydrophobic solids", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015, O 4-5
74. P.B.Kowalczyk, J.Zawała, A.Niecikowska, K.Małyś "Influence of short chain alkyl amine on flotation hydrophobicity and bubble attachment to the quartz surface", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015, p.25

75. P.B.Kowalczyk, J.Zawała, A.Nieczkowska, K.Małyś "Flotation, hydrophobicity and bubble attachment to the quartz surface in the presence of hexylamine", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Conf. on Methods and Materials for Separation Processes SSTP 2015, Karpacz 2015
76. M.Kozieł, M.Gryl, W.Łasocha "Nietypowe połączenie koordynacyjne  $\{Zn_2(1,3pn)_6Cl_4\}$ ", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015, p.294 [ISBN 978-83-939559-4-7]
77. A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, B.Matlak, K.Matlak, J.Korecki "Growth and magnetic properties of ultrathin epitaxial FeO films and Fe/FeO bilayers on MgO(001)", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.362 [ISBN 978-83-62079-22-3]
78. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, P.Warszyński "Functional ultrathin polyelectrolyte coatings formed with reduced graphene oxide and Prussian Blue nanoparticles as a sensitive tool for H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> detection", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
79. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Multifunctional hybrid ultrathin polyelectrolyte coatings", Book of Abstracts. 7<sup>th</sup> Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS 2015, Pułtusk 2015
80. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Nanostrukturalne filmy polielektrolitowe jako funkcjonalne powłoki", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.265 [ISBN 978-83-60988-20-6]
81. M.Krzan, E.Jarek, E.Santini, H.Petkova, V.Ulaganathan, M.Lofti, A.Javadi, F.Ravera, R.Todorov, P.Warszyński, E.Mileva, R.Miller, D.Exerowa, L.Ligierri "Stable and biocompatible particle laden foams – the influence of interfacial properties of the mixed adsorption layer on foam film stability and elasticity", Book of Abstracts. Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015
82. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "Bubble motion in ionic surfactants solutions – influence of various inorganic electrolytes", Book of Abstracts. COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015, p.72
83. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "Influence of inorganic electrolytes on bubble motion in CTAB and SHS solutions", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
84. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Ligierri, D.Exerowa "Stable and biodegradable aqueous foams for industrial or biomedical applications", Book of Abstracts. COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015, p.36

85. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Ligierri, D.Exerowa "Stable and biocompatible particle laden foams and interfacial properties of the mixed adsorption layer", Book. of Abstracts. 5<sup>th</sup> Int. Conf. on Biofoams, Sorrento 2015
86. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Ligierri, D.Exerowa "The influence of colloidal particles on the foam film stability and elasticity", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
87. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "In situ QCM-D investigation of silver nanoparticle monolayer formation on polycation modified surfaces", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015, p.61
88. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Osadzanie nanocząstek srebra na modyfikowanej powierzchni SiO<sub>2</sub> – badania QCM oraz SEM", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.33
89. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Silver nanoparticle monolayers on PAH modified surfaces: QCM and SEM studies", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.327 [ISBN 978-83-60514-22-1]
90. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Formation of silver nanoparticle monolayers on PAH modified surfaces- QCM and SEM studies", in; "Badania i Rozwój Młodych Naukowców w Polsce 2015 - Materiały konferencyjne", Wrocław 2015, Wydawnictwo Młodzi Naukowcy, Poznań 2015, P.2, [ISBN 978-83-942083-3-2]
91. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska, M.Oćwieja "Silver nanoparticle deposition on PAH and fibrinogen monolayers", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, p.6-13
92. M.Kujda, Z.Adamczyk "Physicochemical studies of synthetic cross-linked albumin dimer", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015, p.9926
93. M.Kujda, Z.Adamczyk "Physicochemical characteristics of albumin dimer and its monolayers on solid surfaces – electrokinetic studies", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015, p.26
94. M.Kujda, Z.Adamczyk "Interactions of serum with polyelectrolyte-stabilized liposomes", Book of Abstracts. Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015, p.15
95. M.Kujda, M.Morga, Z.Adamczyk, E.Kowalska "Charakterystyka porównawcza właściwości fizykochemicznych monomeru i dimeru albuminy ludzkiej", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.34

96. A.Kupczak, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, M.Łukomski, A.Działo, R.Kozłowski "HERIe - oprogramowanie do ilościowej oceny zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania parametrów klimatycznych", Mater. 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ'15', Warszawa 2015
97. A.Kupczak, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, M.Łukomski, A.Działo, R.Kozłowski "HERIe - oprogramowanie do ilościowej oceny zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania parametrów klimatycznych", Mater. Warsztat 'Ocena ryzyka w obszarze dziedzictwa kultury', Kraków 2015
98. A.Kupczak, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Łukomski "Risk index calculator – a software tool for a quantitative assessment of risk of physical damage to objects vulnerable to climate variations", Book of Abstracts. 1<sup>st</sup> Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, London 2015
99. Ł.Kuterasiński, M.Gackowski, E.Włoch, J.Kryściak-Czerwenka, K.Durczyk, A.Dziedzicka, E.Bieleńska, M.Derewiński "Distinction of Brønsted acid sites in MFI type boronates", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.260 [ISBN 978-83-60514-22-1]
100. E.Lalik, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, T.Szumelda, E.Bieleńska "Thermokinetic oscillation in recombination of hydrogen and oxygen on Pd-based catalysts", Materiały. Konf. 'Wybrane aspekty bezpieczeństwa elektrowni jądrowej w Polsce', Mądralin 2015
101. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Reakcja rekombinacji wodoru i tlenu w obecności katalizatorów bimetalicznych Pd-Pt na nośnikach SiO<sub>2</sub> i MoO<sub>3</sub>", Materiały. Konf. 'Wybrane aspekty bezpieczeństwa elektrowni jądrowej w Polsce', Mądralin 2015
102. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrogen and oxygen recombination reaction on SiO<sub>2</sub> and MoO<sub>3</sub> supported bimetallic Pd-Pt catalysts", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.125-126 [ISBN 978-83-60514-22-1]
103. Ł.Lewicki, B.Sulikowski "Ultrastabilne zeolity typu Y jako katalizatory transformacji węglowodorów z klasy terpenów", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.128-129 [ISBN 978-83-60514-22-1]
104. M.Leżańska, A.Pacula, A.Olejniczak, J.P.Łukasiewicz "Physicochemical characterisation of new carbons prepared from chitosan using uniform spherical silica particles as a template", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.113-114 [ISBN 978-83-60514-23-8]
105. M.Lipiński, F.Granek, M.Palewicz, Z.Starowicz, R.P.Socha, A.Kędra "Influence of the metallic nanoparticles on the organic solar cells properties", Book of Abstracts. European Congr. and Exhibition on Advanced Materials and Processes EUROMAT 2015, Warszawa 2015, 1575-E11

106. M.Lipiński, G.Kulesza-Matlak, Z.Starowicz, K.Gawlińska, Ł.Major, R.P.Socha, A.Kędra "Opto-electronic properties of the nanostructures made of PbS, organic-inorganic perovskites and plasmonic metal nanoparticles", Book of Abstracts. E-MRS Spring Meeting, Lille 2015, AVIII-30
107. M.Lipiński, G.Kulesza-Matlak, Z.Starowicz, Ł.Major, R.Major, R.P.Socha, A.Kędra "Investigation of the nanocomposite structures based on the organic-inorganic halide perovskite materials and plasmonic metal nanoparticles", Book of Abstracts. European Congr. and Exhibition on Advanced Materials and Processes EUROMAT 2015, Warszawa 2015, 583-E11
108. M.Lipiński, R.P.Socha, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, Z.Starowicz, Ł.Major, K.Drabczyk, K.Gawlińska, K.Łaba "Perovskite nanoparticles used as light converter for solar cell", Book of Abstracts. Conf. Microtechnology and Thermal Problems in Electronics MICROTHERM 2015, Łódź 2015, p.97-100
109. K.Luberda-Durnaś, A.Gonzalez Guillen, M.Oszajca, W.Łasocha "X-Ray Diffraction as the Useful Tool for Synthesis Optimization", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]
110. K.Luberda-Durnaś, A.Gonzalez Guillen, M.Oszajca, W.Łasocha "Hybrid organic-inorganic material - ZnS(m-xylylenediamine)<sup>1/2</sup>", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.263 [ISBN 978-83-60514-22-1]
111. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Kinetics of silver ion release from nanoparticles of controlled surface properties", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomierz 2015, p.29
112. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna suspensji oraz monowarstw nanocząstek srebra osadzonych na powierzchniach stałych", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.36
113. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Release of silver ions from nanoparticles stabilized by low-molecular-weight organic compounds", Book of Abstracts. Conf. Suspensions - designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Kraków 2015, p.18
114. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, D.Jantas, P.Warszyński "The PCL nanoparticles as neuroprotectants-loaded nanocarriers for brain drug delivery", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.311 [ISBN 978-83-60988-20-6]
115. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of nanoparticles containing low-soluble active agents using sonicated-assisted layer-by-layer (SLbL) technology", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.204 [ISBN 978-83-60988-20-6]
116. W.Łasocha, A.Borowiec, W.Nitek, P.Serda, A.Rafalska-Łasocha "Nowe peroksozwiązki Mo(VI) z kwasami nikotynowym i pikolinowym", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]

117. W.Łasocha, M.Oszajca, A.Szymańska, K.Pamin, J.Połtowicz "Badania fizykochemiczne i katalityczne molibdenianów aniliny i jej pochodnych", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.131 [ISBN 978-83-60514-22-1]
118. W.Łasocha, M.Oszajca, A.Szymańska, K.Pamin, J.Połtowicz "Nowe związki polioksomolibdenowe jako katalizatory procesów epoksydacji", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.130 [ISBN 978-83-60514-22-1]
119. A.Maciej, A.Wadas, M.Sowa, R.Socha, W.Simka "Anodic Oxidation of Galvanic Zn-Ni Alloy Coatings in Selected Alcoholic Solutions", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.115-116 [ISBN 978-83-60514-23-8]
120. A.Maciej, A.Wadas, K.Szymańska, R.Socha, W.Simka "Colorizing of Zn-Co Alloy Coatings Treated Anodically in Alcoholic Solutions", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.117-118 [ISBN 978-83-60514-23-8]
121. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bielańska, B.Napruszewska "Otrzymywanie biwarstw ditlenek tytanu/nanocząstki srebra w procesie kontrolowanej dyfuzji", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.38
122. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bielańska, B.Napruszewska "Titanium dioxide/silver nanoparticle bilayers prepared in self-assembly processes", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015, p.31
123. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bielańska, B.Napruszewska "Preparation of titanium dioxide/silver nanoparticle bilayers under diffusion-controlled processes", Book of Abstracts. Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015, p.36
124. J.Maciejewska, M.Sadowska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Nanoparticle monolayers on colloid carrier particles", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015, p.74
125. D.Majda, K.Mlekodaj, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes in comparison with other methods of characterization of the mesoporous SBA-15 silica", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
126. D.Majda, K.Tarach, K.Góra-Marek, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes for characterization of mesoporous SBA-15 silicas", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Central and Eastern European Conf. on Thermal Analysis and Calorimetry CEEC-TAC3, Ljubljana 2015

127. D.Majda, K.Tarach, K.Góra-Marek, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Water thermoporosimetry as a tool of characterization of the textural parameters in mesopore systems", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Central and Eastern European Conf. on Thermal Analysis and Calorimetry CEEC-TAC3, Ljubljana 2015
128. G.Marcì, E.I.García-López, M.Bellardita, F.R.Pomilla, L.Palmisano, A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka "Confronto tra attività catalitica e fotocatalitica dell'eteropoliacido di Keggin  $H_3PW_{12}O_{40}$  supportato su ossidi o su nanotubi di carbonio", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Workshop Nazionale AICIng Molecules and materials: chemistry for engineering, Rome 2015, p.80 [ISBN 9788879598774]
129. A.Michna, Z.Adamczyk, P.Batys "Revealing the Formation and Stability of PDADMAC Monolayers on Mica via Electrokinetic and Colloid Enhancement Techniques", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, p.2-8
130. A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Strojecki "Źródła pyłu zawieszonego i jego osiadanie w Kościele Mariackim w Krakowie w kontekście konserwacji ołtarza Wita Stwosza", Mater. 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ' 15', Warszawa 2015
131. E.Młynczak, B.Matlak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, N.Spiridis, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Magnetic exchange coupling effects observed in Fe/CoO bilayers and Fe/CoO/Fe trilayers epitaxially grown on MgO(001)", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.364 [ISBN 798-83-62079-22-3]
132. G.Mordarski, R.Socha, E.Lalik "Electrical measurements during oscillatory sorption of hydrogen in palladium powder", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.120 [ISBN 978-83-60514-23-8]
133. M.Morga, Z.Adamczyk, D.Kosior "A Quantitative determination of silica monolayer formation and stability; *in situ* streaming potential Studies". Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.61-62 [ISBN 978-83-60514-23-8]
134. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Electrkinetic characteristics of poly-l-lysine monolayers on mica", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.63 [ISBN 978-83-60514-23-8]
135. M.Mosiąlek, M.Krzan, M.Tatko, E.Bielańska, A.Kędra, A.Michna, E.Czerlunczakiewicz "Composite cathode materials for solid oxide fuel cells", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> E-MRS Conf. 'Composites and ceramic materials - technology, application and testing', Białowieża 2015, p.44
136. M.Mosiąlek, J.Michalska, W.Simka, R.P.Socha, W.Dec, M.Jaworska-Kik "The effect of sulphate-reducing bacteria biofilm on passivity and corrosion resistance of 2205 duplex stainless steel", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.121 [ISBN 978-83-60514-23-8]

137. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Determining mechanism of fibrinogen and human albumin adsorption on mica via AFM, SEM and optical microscopy", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.123 [ISBN 978-83-60514-23-8]
138. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska "Określenie konformacji fibrynogenu na podstawie pomiarów adsorpcji mikrocząstek polimerycznych", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego Gdańsk 2015, p.170 [ISBN 978-83-60988-20-6]
139. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska "Wyznaczenie konformacji białka (fibrynogenu) na podstawie pomiarów adsorpcji cząstek koloidalnych", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.41
140. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Kujda, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Fibrinogen and Human Serum Albumin Monolayer Characterization by Colloid Deposition", Book of Abstracts. 79<sup>th</sup> Prague Meeting on Macromolecules 'Functional Polymers at Bio-Material Interfaces', Prague 2015, p.59
141. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Kujda, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Charakterystyka konformacji białek przy użyciu wzmocnienia koloidalnego", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.176 [ISBN 978-83-60988-20-6]
142. A.Niecikowska, A.Wiertel, J.Zawała, K.Małyś "Effect of the bubble dimensions and the shape deformation degrees on its coalescence time at free water surface", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015, p.48
143. E.Niedziałkowska, M.Szaleniec "Expression, purification and characterization of steroid C25 dehydrogenase from Sterolibacterium denitrificans in E. coli expression system", Book of Abstracts. 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015, p.76
144. E.Niedziałkowska, M.Szaleniec "Heterologous expression of steroid C25 dehydrogenase from Sterolibacterium denitrificans - a MGD, FeS and hem containing heterotrimer", Book of Abstracts, Conf. 'Multi-Pole Approach to Structural Science', Warszawa 2015, p.181
145. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Teoretyczny opis właściwości redokсовых układów Cu-HPA", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.227-228 [ISBN 978-83-60514-22-1]
146. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Kirpsza, M.Witko "Catalytic activity of selected heteropolyacids. Theory vs. experiment", Book of Abstracts. Conf. 'Multiscale phenomena in molecular matter', Krakow 2015, p.64
147. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, K.Pamin "Wpływ gliceryny jako jednego z ligandów na adsorpcję reagentów tlenowych na wybranych kationach metali przejściowych", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.226 [ISBN 978-83-60514-22-1]

148. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Właściwości utleniające modyfikowanych heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych. Obliczenia DFT", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.73-74 [ISBN 978-83-60514-22-1]
149. P.Nowak "Polarization resistance of corroding magnesium alloys", Book of Abstracts. Conf. 'Antykorozja - Systemy-Materiały-Powłoki", Ustroń-Jaszowiec 2015
150. P.Nowak, M.Bobruk, T.Wieczorek, Ł.Nieużyła, G.Nawrat "Equivalent electrical circuit of corroding magnesium alloy electrodes", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.125 [ISBN 978-83-60514-23-8]
151. M.Oćwieja "Synteza i stabilność nanocząstek metali oraz ich monowarstw", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
152. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Adsorption of Tannic Acid on Polyelectrolyte Monolayers Determined by IN SITU Streaming Potential Measurements", Book of Abstracts. 79<sup>th</sup> Prague Meeting on Macromolecules 'Functional Polymers at Bio-Material Interfaces', Prague 2015, p.60
153. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, D.Lupa "Mechanisms of silver ion and nanoparticle release from antibacterial coatings", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, p.14-18
154. M.Oćwieja, A.Gorczyca, E.Pociecha "The influence of silver nanoparticles of controlled surface properties on physiological state of Triticum aestivum seedlings", Book of Abstracts. Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
155. M.Oćwieja, A.Gorczyca, E.Pociecha, Z. Adamczyk "The influence of stabilizing agent molecules on the biological activity of silver nanoparticles", Book of Abstracts. 7 Krajowa Konf. Nanotechnologii, Poznań 2015, p.129
156. A.Olejniczak, M.Leżańska, A.Pacula, P.Nowak, J.Włoch, J.P.Łukaszewicz "Hydrogel-based synthesis from sustainable biopolymers of nitrogen-doped mesoporous carbons with high capacitive performance", Book of Abstracts. Annual World Conf. on Carbon - CARBON 2015, Dresden 2015
157. J.Olszówka, E.Bieleńska, D.Napruszewska, R.Karcz, E.M.Serwicka "Benign catalytic oxidation of cyclohexanone to  $\epsilon$ -caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite catalysts", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015, p.64
158. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bieleńska, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Utlenianie cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kaprolaktonu przy pomocy nadtlenu wodoru na katalizatorach hydrotalkitowych o różnym stopniu krystaliczności", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.148-149 [ISBN 978-83-60514-22-1]

159. Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Żbik, K.Sidor, M.Świrski, R.van Eldik, L.Fiedor, G.Stochel "Tuning of the stability of the photosynthetic magnesium complexes on the biosynthetic pathway", Book of Abstracts. 21<sup>st</sup> Int. Symp. on the Photophysics and Photochemistry of Coordination Compounds, Krakow 2015, PP081
160. M.Oszajca, A.Kmak, W.Łasocha, "Badania strukturalne połączeń typu MXY(amina)Z na bazie proszkowych danych dyfrakcyjnych", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]
161. A.Pacula, M.Ruggiero-Mikołajczyk, E.Bielańska "Nitrogen-doped carbon materials derived from Mg-Mn-Al layered double hydroxides and acetonitrile as electrode materials", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.128 [ISBN 978-83-60514-23-8]
162. A.Pacula, R.P.Socha, E.Bielańska "Nitrogen-doped carbon materials derived from Mg-Fe-Al layered double hydroxides and acetonitrile as electrocatalysts for oxygen reduction reaction", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.127 [ISBN 978-83-60514-23-8]
163. H.Pálková, M.Zimowska, L.Jankovič, B.Sulikowski, E.M.Serwicka J.Madejová "Stability of tetrabutyl-phosphonium and -ammonium modified montmorillonite in inorganic acid", Book of abstracts. European Clay Conf. Euroclay 2015, Edinburgh 2015, p.335
164. K.Pamin, A.Ładocha, S.Basąg, W.Kubiak, J.Połtowicz "Elektrochemiczne badanie właściwości soli metali przejściowych kwasów fosforomolibdenowego i fosforowolframowego", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.276 [ISBN 978-83-60514-22-1]
165. K.Pamin, J.Połtowicz "Keggin-type heteropolianions and their hybrids with porphyrin as catalysts for Baeyer-Villiger oxidation", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015, PC 551
166. K.Pamin, J.Połtowicz, S.Basąg, W.Kubiak, R.Tokarz-Sobieraj "Glycerol as solvent in phenol oxidation with hydrogen peroxide - reaction mechanism", Lectures, Oral Presentation, Poster Presentations and Exhibitions. 7<sup>th</sup> Int. Conf. on Green and Sustainable Chemistry; 4<sup>th</sup> JACI/GSC Symp. Tokyo 2015, p.99
167. K.Pamin, J.Połtowicz, R.Grabowski "Aktywność katalityczna kationowych metaloporfiryn w reakcji utleniania fenolu nadtlaniem wodoru w obecności gliceryny", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.204 [ISBN 978-83-60514-22-1]
168. K.Pamin, J.Połtowicz, R.Grabowski, J.Kryściak-Czerwenka "Spectroscopic and catalytic studies of Keggin-type iron heteropolyacids in H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> phenol oxidation", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015, PC 832

169. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.M.Serwicka "Sole żelazowe heteropolikwasów fosforowolframowego i fosforomolibdenowego jako katalizatory reakcji utleniania cykloheksanonu do cyklolaktonu tlenem molekularnym", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.205 [ISBN 978-83-60514-22-1]
170. K.Pamin, J.Połtowicz, N.Wolan, R.Tokarz-Sobieraj, A.Adamski "Glycerol as alternative solvent in phenol oxidation catalyzed by macrocyclic metallocomplexes with hydrogen peroxide", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015, p.387
171. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Release mechanism of cisplatin from carbon nanotube capped by magnetic nanoparticles. A molecular dynamics study", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes NT15, Nagoya 2015
172. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Influence of Sidewall Functionalization of Carbon Nanotubes on Adsorption of Magnetic Nanoparticles. Molecular Dynamics Study", Proceedings. 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015 [ISBN 978-83-7784-669-8]
173. T.Pańczyk, P.Wolski, Ł.Kończak "Carbon nanotubes as drug delivery systems. Insights from molecular simulations", Book of Abstracts. 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
174. G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of Cleavable Esterquad Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/water Interface", Book of Abstracts. COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015, p.62
175. P.Pasierb, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, D.Duraczyńska, M.Kołodziej, A.Dziedzicka "Synthesis of Pd catalysts with the use of CeO<sub>2</sub> doped Sr as supports and their application in the hydrogenation of cinnamaldehyde", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.150 [ISBN 978-83-60514-22-1]
176. E.Pięta, N.Piergies, B.Boduszek, T.K.Olszewski, M.Nattich-Rak, E.Proniewicz "Potential-dependent SERS investigation of the adsorption of (diphenylphosphoryl)(pyridin-2-yl) methanol on Ag, Au and Cu electrodes", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Advanced Vibrational Spectroscopy ICAVS, Vienna 2015, p.642-643 [ISBN 978-3-200-04205-6]
177. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "The beta2-adrenergic receptor conformation and the ligand association/dissociation characteristics", Book of Abstracts. Conf. 'Membrane Signalling and Transport: Computation and Experiment', Oxford 2015
178. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "On the prediction of the stereochemistry-dependent characteristics of ligand-receptor interactions, Book of Abstracts. Conf. 'Membrane Signalling and Transport: Computation and Experiment', Oxford 2015
179. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "The conformation of the beta2-adrenergic receptor and its influence on the ligand association/dissociation characteristics", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Workshop on Expression, Structure and Function of Membrane Proteins, Firenze 2015

180. A. Płazińska, W. Płaziński, K. Rolak-Piwowarska, K. Józwiak "The influence of the  $\beta$ 2-adrenergic receptor genetic polymorphism on the interactions with agonists. A molecular modeling study", Book of Abstracts. 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
181. W. Płaziński, A. Płazińska, M. Drach "Modeling of the stereochemistry-dependent interactions between beta2-adrenergic receptor and its agonist ligands", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Workshop on Expression, Structure and Function of Membrane Proteins, Firenze 2015
182. W. Płaziński, A. Płazińska, M. Drach "QM/MM study on the mechanism of the glucose ring-opening reaction", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Congr. of Quantum Chemistry, Beijing 2015
183. W. Płaziński, A. Płazińska, M. Drach "Water-catalyzed mechanism of the ring-opening reaction of glucose". Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Conf. on Catalysis, Suzhou 2015
184. W. Płaziński, A. Płazińska, M. Drach "Mechanism of the water-assisted ring-opening reaction in hexopyranoses". Book of Abstracts. 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
185. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, A. Dudzik, M. Szaleniec, P. Warszyński "Matryce alginianowe jako nośnik komórek bakterii E.coli w katalizie enzymatycznej", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.292 [ISBN 978-83-60988-20-6]
186. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, A. Karabasz, M. Bzowska, J. Korecki, E. Bielańska, P. Warszyński "Synthesis of polyelectrolyte nanocapsules with iron oxide nanoparticles for magnetic targeting", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
187. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, A. Karabasz, M. Bzowska, J. Korecki, P. Warszyński "Synthesis and characterization of Gadolinium-Alginatenanogels for biomedical applications" Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.310 [ISBN 978-83-60988-20-6]
188. G. Potasiewicz, K. Szczepanowicz, T. Kruk, E. Bielańska, P. Warszyński, B.R. Burg, J. Zurcher, S. Zimmermann, T. Brunschweiler "Formation of capillary-bridges by sol-gel technique with flexible additions and with embedded nanoparticles for thermal joints", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, I KiFP PAN, Kraków 2015, p.239 [ISBN 978-83-60514-22-1]
189. M. Prochner, Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik "Cobalamin and folic acid as carriers of potential chemotherapeutic agents based on ruthenium", Book of Abstracts. 21<sup>st</sup> Int. Symp. on the Photophysics and Photochemistry of Coordination Compounds, Krakow 2015, PP093
190. M. Quesne "Utilizing QM/MM techniques in the study of enzyme catalyzed reaction mechanisms", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Scientific Workshop of the COST Action CM1305 "Explicit control over spin states in technology and Biochemistry, Belgrade 2015
191. M. Quesne "How can theoretical techniques inform us of the chemistry of real world catalysts", Material. RSC Inorganic Reaction Mechanisms Discussion Group Meeting, Manchester 2015

192. J.Radoń, A.Kupczak, A.Sałęga, K.Wąs, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "New WUFI®Plus module for modelling indoor climate and energy consumption in museums, libraries and archives", Book of Abstracts. 1<sup>st</sup> Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, London 2015
193. A.Rafalska-Łasocha, M.Bednarz, D.Sarkowicz, Z.Kaszowska, A.Szymańska, W.Łasocha "X-Ray Powder Diffraction Investigations of the Components of Groud Layer in Works by Henryk Siemiradzki", Book of Abstracts. 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]
194. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, Z.Kaszowska, M.Bednarz, W.Łasocha "XRPD w badaniach składu barokowych zapraw malarskich", Mater. 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ'15', Warszawa 2015
195. M.Rogowska, A.Michalik-Zym, D.Napruszewska, E.Bielańska, P.Nowak, E.M.Serwicka "TiO<sub>2</sub>/montmorillonite composites as photocatalysts for degradation of cationic and anionic dyes", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.158 [ISBN 978-83-60514-22-1]
196. M.Rogowska, A.Michalik-Zym, D.Napruszewska, E.Bielańska, P.Nowak, E.M.Serwicka "Comparison of inverse microemulsion method and conventional pillaring in synthesis of transition metal oxide/montmorillonite nanocomposites", Book of abstracts. European Clay Conf. Euroclay 2015, Edinburgh 2015, p.420
197. W.Rojek, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Katalizatory chromitowe jako katalizatory reakcji hydrogenolizy alkoholu furfurylowego", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.71 [ISBN 978-83-60514-22-1]
198. M.Ruggiero, M.Tatko, M.Mosiałek, A.Kędra, P.Nowak, E.Bielańska "Sm<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>–La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>FeO<sub>3</sub> catalyst for the oxygen reduction reaction for solid oxide fuel cells: synthesis and properties", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.330-331 [ISBN 978-83-60514-22-1]
199. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Żelazny, A.Kornas "Porównanie własności elektrochemicznych elektrod Au i Pt w wysokotemperaturowym jednokomorowym ogniwie paliwowym z elektrolitem stałym", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.162-163 [ISBN 978-83-60514-22-1]
200. A.Rugor, T.Janeczko, A.Dudzik, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Selective modifications of steroids and sterols performed by enzymes from Sterolibacterium denitrificans", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.35 [ISBN 978-83-60514-22-1]
201. A.Rugor, A.Wójcik, S.Mordalski, A.Bojarski, M.Szaleniec "MD and QM:MM studies of steroid C25 dehydrogenase catalytic subunit ", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.223 [ISBN 978-83-60514-22-1]

202. A.M.Rugor, A.Wójcik, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szaleniec "Insight into structure and reactivity of steroid C25 dehydrogenase, a molybdenum enzyme hydroxylating sterols", Book of Abstracts. 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015, p.80
203. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, R.Tokarz-Sobieraj, J.Koreck, "Developing Nanotechnology Curricula to Meet Industry and Society Needs", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.427 [ISBN 978-83-60988-20-6]
204. D.Rutkowska-Żbik, Ł.Orzeł, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko, G.Stochel, "Kwantowo-chemiczny opis oddziaływań kompleksów metali przejściowych z kobalaminą", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.349 [ISBN 978-83-60988-20-6]
205. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, Ł.Orzeł, G.Stochel "Transmetalacja porfiryn – kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji. Katalityczny wpływ jonów octanowych.", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.34 [ISBN 978-83-60514-22-1]
206. D.Rutkowska-Żbik, Sz.Wojtyła, M.Buchalska, W.Macyk "Wybrane kompleksy Ti(IV) jako sensybilizatory w układach fotokatalitycznych i ogniwach fotowoltaicznych typu DSSC: Właściwości spektroskopowe", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.224 [ISBN 978-83-60514-22-1]
207. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of colloid superstructure formation", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology IEEE NANO 2015, Rome 2015, p.55
208. K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Kornas, R.P.Socha, K.Góra-Marek, M.Ruggiero, D.Rutkowska-Żbik, J.-F.Paul, D.Mucha, A.Żelazny "Reakcja uwodornienia CO<sub>2</sub> do metanolu na katalizatorach Cu/ZrO<sub>2</sub> – rola odmiany polimorficznej ZrO<sub>2</sub> oraz stanu elektronowego miedzi", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.165-166 [ISBN 978-83-60514-22-1]
209. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński "Symulacje dynamiki molekularnej błony prostaty", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.54
210. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński "Molecular dynamics study of phospholipid bilayers with high cholesterol content", Book of Abstracts. Gordon Research Conf. 'Mechanisms of Membrane Transport', Lewiston 2015
211. M.Skoczek, M.Nosek, T.Piecha, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Voltammetric monitoring of prostatic aggregation and self fusion", Book of Abstracts. Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015, p.31
212. M.Smolik, A.Marczakiewicz-Lustig, B.Jachimska, A.Sawina, D.Dudek, J.Hartwich, "VLDL5 as a biomarker related to Obesity", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Białystok Int. Medical Congr. Young Scientists, Białystok 2015

213. R.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, J.Gurgul, P.Panek "The surface chemistry of silicon etched with Au and Pd metallic and bimetallic catalysts", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015, P1-CAT-10
214. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, J.Barbasz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Zależność stanu chemicznego i morfologii powierzchni krzemu od katalizatora użytego do jego teksturyzacji w procesie MAE", Materiały. 6. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika', Świeradów-Zdrój 2015
215. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, P.Warszyński "The surface chemistry of silicon etched with metallic and bimetallic catalysts", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.151 [ISBN 978-83-60514-23-8]
216. N.Spiridis, K.Freindl, E.Madej, P.Dróżdź, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "The structure and phase composition of iron oxides on Pt(111)", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> European Conf. on Surface Crystallography and Dynamics, Trieste 2015, p.74
217. N.Spiridis, K.Freindl, E.Madej, D.Wilgocka-Ślęzak, P.Dróżdź, J.Korecki "Magnetic properties of ultrathin iron oxide films on Pt(111)", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.152 [ISBN 978-83-62079-22-3]
218. Z.Starowicz, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, M.Lipiński "Simulation and experimental investigations on plasmonic silver nanoparticles for the cell front side application", Book of Abstracts. E-MRS Spring Meeting, Lille 2015, CP1-68
219. Z.Starowicz, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, M.Lipiński "Symulacyjne i eksperymentalne badanie plazmonicznych nanocząstek srebra do zastosowań na przedniej stronie cienkowarstwowego ogniwa krzemowego", Materiały. 6. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika', Świeradów-Zdrój 2015
220. Z.Starowicz, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, M.Lipiński "Wytwarzanie i charakteryzacja struktur plazmonicznych do zastosowań w fotowoltaice", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.56-57
221. A.Stępniewski, T.Bučko, E.Broclawik, L.Benco, M.Radoń, K.Góra-Marek "Interaction of NH<sub>3</sub> and NO with cobalt sites in chabazite: insight from DFT molecular dynamics simulations". Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015, p.125-126 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
222. M.Strojecki, A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Particle sources and deposition in the indoor environment of historic churches", Book of Abstracts. 1<sup>st</sup> Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, London 2015
223. M.Strojecki, A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Aerosol sources and deposition in the indoor environment of historic churches", Book of Abstracts. European Aerosol Conf., Milano 2015

224. B.Sulikowski "Zeolites, nanoclusters and related mesoporous materials: an insight from solid-state NMR spectroscopy standpoint", Book of Abstracts. 20. Forum Zeolitowe, Stryżawa 2015, p.25-26 [ISBN: 978-83-929430-9-9]
225. B.Sulikowski, K.Onik, M.Gackowski, A.Dziedzicka, P.Warszyński, M.Derewiński "<sup>29</sup>Si and <sup>27</sup>Al NMR studies of protozeolitic nanoclusters and related layered materials", Book of Abstracts (V.Valchev, ed.). 6<sup>th</sup> Int. Symp. on Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Sunset Resort 2015, p.47 [ISSN 1314-4375]
226. B.Szafran, P.Wójcik, B.Spisak, K.Griffin, D.Rutkowska-Żbik, P.Queipo, T.Zazdrozny, C.Kiparissides, O.Kammona, F.Ntow, S.Friedrichs, A.Duschl "Who will produce the safe nanomaterials? University teaching content in nanotechnology studies does not match job skill demands in the nanotechnology industry", Program and Abstracts. Int. Congr. on Safety of Engineered Nanoparticles and Nanotechnologies, Helsinki 2015, p.28 [ISBN 978-952-261-532-9]
227. M.Szaleniec, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, A.Rugor, M.Tataruch "Bacterial dehydrogenases from *S. denitrificans* - biocatalytic tools for modification of sterols and steroids", Workshop Booklet. Workshop on Agricultural Biotechnology and Biocatalysis, Warszawa 2015, p.72
228. M.Szaleniec, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, A.Rugor, M.Tataruch, M.Wasylewski "Steroid C25 dehydrogenase - a novel catalyst for regioselective hydroxylation of cholesterol and its derivatives", World Congr. on Beneficial Microbes: Food, Pharma, Aqua & Beverages Industry, Valencia 2015, Fermentation Technol., 2015, 3(2) (2015) p.36 [ISSN 2167-7972]
229. M.Szaleniec, J.Heider "QM:MM study of the ethylbenzene dehydrogenase reaction mechanism", Book of Abstracts. 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfüred 2015, p.44
230. M.Szaleniec, D.Knack, J.Heider "Enzymatic C-C bond formation by benzylsuccinate synthases: a theoretical study of the reaction mechanism", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.36 [ISBN 978-83-60514-22-1]
231. M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider "Czy modelowanie teoretyczne jest wiarygodnym narzędziem do badania reaktywności enzymów?", Książka abstraktów. 42. Ogólnopolska Szkoła Chemii 'Chemia z głębi ziemi', Lubenia 2015, p.29
232. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, T.Kruk, J.Bereta, P.Warszyński "Pegylated polyelectrolyte nanocapsules as anticancer drug vehicles for passive targeting" Book of Abstracts. Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015, p.12
233. K.Szczepanowicz, L.Cristofolini, T.Rimoldi, D.Orsi, F.Albertini, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules for hyperthermia", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.324 [ISBN 978-83-60988-20-6]
234. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, M.Piotrowski, T.Kruk, P.Warszyński, A.Karabasz "Targeted drug delivery systems based on polyelectrolyte nanocapsules", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.178 [ISBN 978-83-60988-20-6]

235. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, T.Kruk, M.Piotrowski, M.Łapczyńska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as Promising Drug Delivery System", Book of Abstracts. 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Microencapsulation, Boston 2015, p 29
236. K.Szczepanowicz, G.Para, L. Szyk-Warszyńska, K.A.Wilk, P.Warszyński "Role of surfactant/polimer complex in the formation of nanocapsules", Book of Abstracts. Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015, p.38
237. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, A.Pacula, E.Bielańska, M. Ruggiero "An effect of the type of metal component in the PdM/C (M = Au, Ir, Pt, Ru) catalysts on control of C=O/C=C hydrogenation in cinnamaldehyde", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.176-177 [ISBN 978-83-60514-22-1]
238. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, R.P.Socha, T.Ślęzak, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.152 [ISBN 978-83-60514-23-8]
239. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.404 [ISBN 978-83-62079-22-3]
240. M.Ślęzak, T.Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, B.Matlak, P.Drózd, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Oscillating magnetic anisotropy in epitaxial Co/Fe(110) films on W(110)", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.374 [ISBN 978-83-62079-22-3]
241. T.Ślęzak, A.I.Chumakov, A.Kozioł-Rachwał, R.Ruffer, N.Spiridis, M.Ślęzak, M.Zajac, J.Korecki "Resolving the complex spin structures with Nuclear Resonant Scattering Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.424 [ISBN 978-83-62079-22-3]
242. M.Śliwa, B.Marszałek, M.Strzempek, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Badania oddziaływań materiałów MOF z substancjami o właściwościach terapeutycznych", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.301-302 [ISBN 978-83-60514-22-1]
243. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Adsorpcja izoform wołowej β-laktoglobuliny z zastosowaniem mikrowagi kwarcowej QCM-D", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.215 [ISBN 978-83-60514-22-1]
244. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Funkcjonalne warstwy wołowej β-laktoglobuliny jako nośniki biomolekuł", Mater. 5.V Konf. Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2015

245. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Mechanism of bovine  $\beta$ -lactoglobulin isoforms adsorption on gold surface", Mater. Konf. 'Horyzonty Nauki: Giełda Prac Dyplomowych', Kraków 2015
246. S.Świątek, B.Jachimska "Bovine  $\beta$ -lactoglobulin layers on gold surface: Role of ionic strength", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
247. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Studies of the functional layers of  $\beta$ -lactoglobulin as biomolecules carriers", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
248. S.Świątek, B.Jachimska "Studies of bovine  $\beta$ -lactoglobulin isoform adsorption on gold surface using the quartz crystal microbalance", Mater. Erasmus+ (KA1 – Mobilność edukacyjna) Meeting, Kraków 2015
249. K.A.Tarach, K.Góra-Marek, J.Tekla, U.Filek, W.Makowski "Ethanol dehydration process regarding acidic properties and type of mesoporous structure of zeolites ZSM-5", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.304 [ISBN 978-83-60514-22-1]
250. M.Tataruch, E.Luchter-Wasylewska, M.Szaleniec "Immobilizowana dehydrogenaza etylobenzenowa – molekularne rzędzie do syntezy optycznie czystych alkoholi", Materiały. 1.Konf. Naukowa 'Enzymy w nauce i przemyśle ENZYMOS', Lublin 2015
251. M.Tataruch, K.Szymańska, A.Jarzębski, A.Dudzik, M.Szaleniec "Synteza alkoholi chiralnych przy zastosowaniu reaktora przepływowego z immobilizowaną dehydrogenazą fenyloetanolową", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.217 [ISBN 978-83-60514-22-1]
252. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Investigation of interaction between PAMAM dendrimers and SiO<sub>2</sub> surface", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
253. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Analysis of the PAMAM dendrimers-BSA complexes adsorption using QCM-D and MP-SPR techniques", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
254. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Oddziaływania albuminy z dendrymermi typu PAMAM", Mater. 5. Konf. Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2015
255. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Determination of the impact of PAMAM dendrimers on serum albumin", Mater. Konf. 'Horyzonty Nauki: Giełda Prac Dyplomowych', Kraków 2015
256. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Interactions between albumin and dendrimers", Mater. Erasmus+ (KA1 – Mobilność edukacyjna) Meeting, Kraków 2015
257. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Multifunctional macromolecules (G6 PAMAM dendrimers) as potential candidates for application to catalysis", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.333 [ISBN 978-83-60514-22-1]

258. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Właściwości redoksove heteropolikwasów modyfikowanych miedzią. Obliczenia DFT", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.351 [ISBN 978-83-60988-20-6]
259. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, U.Filek "Redox properties of modified Cu-HPA", Book of Abstracts. 17<sup>th</sup> Int. Symp.on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, Utrecht 2015, p.338
260. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, U.Filek, M.Witko "Redox properties of modified Cu-HPA", Proceedings. 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015, p.272-273 [ISBN 978-83-7784-669-8]
261. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, M.Witko "Properties of modified molybdenum and tungsten heteropolyacids. DFT calculations vs. experimental results", Book of Abstracts. 17<sup>th</sup> Int. Symp.on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, Utrecht 2015, p.338
262. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oddziaływania heteropolikwasów modyfikowanych metalami przejściowymi z rozpuszczalnikiem i reaktywnymi formami tlenu", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.340 [ISBN 978-83-60988-20-6]
263. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko, K.Pamin "Geometric Environment vs. Adsorption Properties of Transition Metal Ions Introduced in HPA. DFT Calculations", Proceedings. 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015, p.93-94 [ISBN 978-83-7784-669-8]
264. V.Ulaganathan, G.Gochev, M.Krzan, S.S.Dukhin, C.Gehin-Delval, R.Miller "Effect of pH and salt concentration on velocity of rising bubbles in Beta-Lactoglobulin solution", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
265. V.Ulaganathan, G.Gochev, M.Krzan, S.S.Dukhin, C.Gehin-Delval, R.Miller "Effect of pH and salt concentration on velocity of rising bubbles in Beta-Lactoglobulin solution", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
266. G.Trefalt, F.J.Montes Ruiz-Cabello, M.Moazzami-Gudarzi, M.Elzbieciak-Wodka, P.Maroni, C.Labbez, M.Borkovec "Interactions between Charged Surfaces in the Presence of Multivalent Ions: Comparison of Counterions and Coions", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
267. V.Valmacco, M.Elzbieciak-Wodka, G.Trefalt, P.Maroni, M.Borkovec "Tuning the properties of silica surfaces by heat treatment", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
268. P.Warszyński, G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, E.Jarek, K.A.Wilk "Adsorption of Cleavable Esterquat Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/Water Interface", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015, PI-24 P

269. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Charakterystyka monowarstw fibrynogenu na micy przy pomocy metod elektrokinetycznych i wzmocnienia koloidalnego", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.58
270. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Properties of fibrinogen monolayers on mica - electrokinetic and colloid deposition studies", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, p.5-7
271. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska "Charakterystyka monowarstw fibrynogenu na micy przy pomocy metod elektrokinetycznych i wzmocnienia koloidalnego", Book of Abstracts. Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015, p.36
272. M.Wasylewski, A.Dudzik, M.Jemioła-Rzemińska, M.Szaleniec "Calorimetric and computational study of the catalytic mechanism of 1-(S)-phenylethanol dehydrogenase, Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2015, p.218 [ISBN 978-83-60514-22-1]
273. P.Weroński, P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek "Effective diffusivity of colloidal particle multilayers", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
274. P.Weroński, P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek "Synthesis and quantitative characterization of non-conductive colloidal particle multilayers" Book of Abstracts. 2015 AEESP Research and Education Conf., New Haven 2015
275. P.Weroński, M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek "Application of Rotating Disk Electrode Technique in Studies of Supported Thin Films of Spherical Particles", Book of Abstracts. 7<sup>th</sup> Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS 2015, Pułtusk 2015, p.74
276. A.Węgrzynowicz, J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bieleński; "Otrzymywanie monowarstw nanocząstek hematytu na powierzchni miki na drodze procesów samoorganizacji", Book of Abstracts. Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015, p.59
277. D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozłowski, T.Kołodziej, T.Gieła, M.Ślęzak, N.Spiridis, J.Raabe, N.Pilet, J.Korecki "Temperature evolution of the surface magnetic domain structure in single crystalline magnetite", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.391 [ISBN 978-83-62079-22-3]
278. D.Wiśnios, A.Kiejna, J.Korecki "First principles study of the adsorption of MgO molecules on a clean Fe(001) surface", Book of Abstracts. 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015, p.385 [ISBN 978-83-62079-22-3]
279. M.Witko "Woman in Science; whether stereotype or feminism", Proc. Humboldt-Kolleg Conf. 'Ethics in Science and Life' (B.Buszewski, M.Jaskuła, eds.), Kreatos Marta Kucza, Kraków 2015, p.52 [ISBN 978-83-942248-0-6]

280. M.Witko, P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Kirpsza "Catalytic activity of selected heteropolyacids. Theory vs. experiment", Book of Abstracts. Conf. 'Multiscale phenomena in molecular matter', Krakow 2015, p.64
281. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzyński, S.Zapotoczny, R.von Klitzing, P.Warszyński "Effect of supporting cushion materials and deposition conditions on the formation of POPC/POPE lipid bilayers", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, O142
282. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Formation of POPC/POPE lipid bilayers on polyelectrolyte films. Influence of supporting cushion materials and deposition conditions", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.66 [ISBN 978-83-60988-20-6]
283. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Incorporation of quantum dots into lipid bilayers supported on polyelectrolyte multilayers", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015, p.73 [ISBN 978-83-60988-20-6]
284. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Supported POPC/POPE lipid bilayer modified with quantum dots", „ Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, P2-24
285. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "POPC/POPE lipid vesicles deposition on polyelectrolyte films", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015, p.90
286. J.Wojewoda-Budka, A.Wierzbička-Miernik, L.Lityńska-Dobrzyńska, M.Szczerba, G.Mordarski, M.Mosiąlek "Microstructure characteristics and phase transformation after heat treatment of the Ni-P and Ni-Re-P coatings electroless deposited", Book of Abstracts. 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.171 [ISBN 978-83-60514-23-8]
287. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics study of Doxorubicin interaction with suspensions of modified carbon nanotubes", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
288. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics study of Congo red interaction with carbon nanotubes", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes NT15, Nagoya 2015
289. P.Wolski, T.Pańczyk, "Modeling of adsorption of organic dyes on single walled carbon nanotube", Proceedengs. 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015 [ISBN 978-83-7784-669-8]
290. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics symulations of adsorption of organic dyes on single walled caron nanotube", Book of Abstracts. 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Sympozjum PTBI, Lublin 2015

291. J.Zawała, S.Dorbolo, K.Małyśa "The bubble bouncing from stagnant and vibrating hydrophilic and hydrophobic solid surfaces", Book of Abstracts. COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015, p.32
292. J.Zawała, D.Kosior, T.Dąbroś, K.Małyśa "Modelling of surface-active substance influence on kinetics of the bubble collision and attachment to hydrophobic surface, Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
293. J.Zawała, D.Kosior, T.Dąbroś, K.Małyśa "Influence of the bubble surface fluidity on collision kinetics and attachment to hydrophobic solids", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015, P 6-12
294. J.Zawała, D.Kosior, T.Dąbroś, K.Małyśa "Modeling of influence of surface mobility on bubble rising velocity and kinetics of three-phase contact formation", Book of Abstracts. Conf. 'Smart and Green Interfaces:Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015, p.14
295. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyśa "Influence of non-slip/slip hydrodynamic boudary conditions at solid surface on attachment of the colliding bubble", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
296. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyśa "On importance of thin liquid films in kinetics of the bubble bouncing and collision with interfaces", Book of Abstracts. Conf. 'Smart and Green Interfaces:Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015, p.55
297. J.Zawała, K.Małyśa "Influence of surface vibrations on kinetics of the bubble coalescence and attachment", Book of Abstracts. 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015, p.50
298. J.Zawała, K.Małyśa "Kinetics of the bubble collisions at resting and vibrating water/gas and water/solid interfaces", Book of Abstracts. 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego Gdańsk 2015 [ISBN 978-83-60988-20-6]
299. J.Zawała, A.Nieczkowska, K.Małyśa "Influence of an air bubble impact velocity on its rupture time at water/air interface – experiments and simulations", Book of Abstracts. COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015, p.71
300. J.Zawała, A.Nieczkowska, K.Małyśa "Influence of bubble size on its coalescence time at water surface – experiments and simulations", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
301. J.Zawała, A.Nieczkowska, K.Małyśa "Kinetics of the bubble collisions and rupture at resting and vibrating liquid/gas and liquid/solid interfaces – experiment and modelling", Book of Abstracts. 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015, P9-10

302. J.Zawała, A.Nieczkowska, A.Wiertel, K.Małyś "Influence of liquid surface tension and viscosity on rising bubble coalescence at resting and vibrationg liquid/gas interfaces", Book of Abstracts. Conf. 'Smart and Green Interfaces:Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015, p.103
303. M.Zimowska, J.Gurgul, K Łątka, L.Matachowski, R Dula, J.Kryściak-Czerwenka, J.Pulit, R.P.Socha "Wpływ dystrybucji Fe w sieci porowatych heterostruktur ilastych typu PCH na aktywność w katalitycznym rozkładzie etanolu", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.195 [ISBN 978-83-60514-22-1]
304. M.Zimowska, Z.Olejniczak, L.Lityńska-Dobrzyńska, J.Gurgul, R.P.Socha, K.Łątka "Structure investigation of Fe doped porous clay heterostructures derived from Laponite", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015, P2-NM-24
305. M.Zimowska, J.Olszówka, J.Gurgul, K.Łątka, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Porowate heterostruktury ilaste na osnowie Laponitu - wpływ dotowania cyną na właściwości fizykochemiczne i katalityczne", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.197 [ISBN 978-83-60514-22-1]
306. M.Zimowska, J.Olszówka, J.Gurgul, K.Łątka, E.M.Serwicka "Physicochemical and catalytic properties of the tin doped porous clay heterostructures", Book of abstracts. European Clay Conf. Euroclay 2015, Edinburgh 2015, p.424
307. M.Zimowska, H.Pálková, L.Jankovič, J.Madejová, E.M.Serwicka "Organiczne pochodne minerałów ilastych jako nośniki i stabilizatory nanocząstek metalicznych", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.320 [ISBN 978-83-60514-22-1]
308. S.Zimowski, M.Zimowska "Abrasive wear resistant study of hard coatings by ball-cratering and ballon-disc methods", Book of Abstracts. 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015, p.352
309. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas "Optymalizacja warunków reakcji hydrogenolizy glicerolu do glikolu propylenowego dla serii katalizatorów AgCu/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>", Book of Abstracts. 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2015, p.201 [ISBN 978-83-60514-22-1]
310. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero, K.Pamin, A.Kornas, K.Gołabek "Ag-Cu/M<sub>x</sub>O<sub>y</sub> catalysts for selective glycerol hydrogenolysis: role of the catalyst composition and reaction conditions", Lectures, Oral Presentation, Poster Presentations and Exhibitions. 7<sup>th</sup> Int. Conf. on Green and Sustainable Chemistry; 4<sup>th</sup> JACI/GSC Symp. Tokyo 2015, p.115
311. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Human fibrinogen monolayers on colloid carrier particles of various charge", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology IEEE NANO 2015, Rome 2015, p.62

## PRACE W DRUKU

1. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, J.Szlachetko, D.L.A.Fernandes, J.Sá "Hydrodechlorination Using Pd–Au Nanoparticles to Convert Chloro-Containing Compounds to Useful Chemicals", Reference Module in Materials Science and Materials Engineering (doi:10.1016/B978-0-12-803581-8.04063-7) Elsevier 2016 książka (in print)
2. E.Broclawik, M.Radoń "Wybrane zastosowania nowoczesnych metod chemii kwantowej", in: "Podstawy i perspektywy chemii koordynacyjnej. T.2 Stan obecny i perspektywy", (Z.Stasicka, G.Stochel, eds.), Wydawnictwo UJ, Kraków 2016, w druku
3. K.Freindl, T.Ossowski, M.Zajac, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, E.Madej, T.Giela, A.Kiejna, J.Korecki "Oxygen Adsorption on the Fe(110) Surface: the Old System - New Structures", J. Phys. Chem. C, submitted
4. A.Gancarczyk, M.Piątek, M.Iwaniszyn, B.Leszczynski, Ł.Mokrzycki, W.Rojek, D.Duraczyńska, T.Machej, J.Łojewska, A.Kołodziej "Single-phase fluid flow through the solid foams - hydrodynamics and catalytic reaction", Catalysis Today, submitted
5. M.Grzesiak-Nowak, A.Rafalska-Łasocha, A.Pawlak, S.Pawelkowicz, W.Łasocha, "Badania  $\mu$ -XRPD i SEM-EDS pigmentów i zapraw w trzech obrazach z kolekcji Muzeum Pałacu Króla Jana III w Wilanowie", Opuscula Musealia, zeszyt 23 (2015), w druku
6. E.Jarek, P.Warszyński, M.Krzan "Influence of various electrolytes on bubble motion in ionic surfactant solutions", Colloid Surf. A; submitted
7. L.Krzemień, M.Łukomski, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.F.Mecklenburg "Mechanism of craquelure pattern formation on panel paintings", Stud. Cons., (jest w PBN)
8. M.Quesne, T.Borowski, S.de Visser "Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Modeling of Enzymatic Processes: Caveats and Breakthroughs", Chem. Eur. J. (in print)
9. A.Rafalska-Łasocha, K.Luberda-Durnaś, E.Modzelewska, A.Pawlak, W.Łasocha "Badania zapraw i bieli w warstwach malarskich w dziełach artystów dworskich króla Jana III Sobieskiego przy pomocy rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej (XRDP)", Opuscula Musealia, zeszyt 23 (2015), w druku
10. M.Zimowska, J.Gurgul, H.Pálková, Z.Olejniczak, K.Łątka "Structural rearrangements in Fe-porous clay heterostructures composites derived from Laponite® - spectroscopic studies", Microporous Mesoporous Mater., submitted
11. M.Zimowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, Z.Olejniczak, J.Gurgul, K.Łątka "Alteration of the structure of crystalline-amorphous porous clay heterostructures upon iron doping from metallo-organic source", Surface Interface Anal., accepted
12. M.Zimowska, K.Łątka, D.Mucha, J.Gurgul, L.Matachowski "The continuous conversion of ethanol and water mixtures into hydrogen over Fe<sub>x</sub>O<sub>y</sub> nanoparticles on MoO<sub>3</sub> support - XPS and Mössbauer studies", J. Mater. Chem. A, submitted

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

1. "XLVII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, XVI Polish Annual Conference on Catalysis, 16-18.03.2015, Kraków" (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków, 2015, pp. 347 [ISBN 978-83-60514-22-1]
2. "4<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, September 2nd-4th, 2015, Krakow, Poland", (G.Mordarski, ed.), IkiFP PAN Kraków, 2015, pp.184 [ISBN 978-83-60514-23-8]

## **OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ**

### **ZGŁOSZENIA PATENTOWE**

1. M.Oćwieja., Z.Adamczyk "Sposób wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra o dodatnim ładunku powierzchniowym", zgłoszenie patentowe RP P.415545 (28 grudnia 2015)
2. M.Oćwieja., Z.Adamczyk "Sposób wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra o dodatnim ładunku powierzchniowym", zgłoszenie patentowe RP P.415546 (28 grudnia 2015)
3. M.Oćwieja., Z.Adamczyk "Sposób wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra o dodatnim ładunku powierzchniowym", zgłoszenie patentowe RP P.415547 (28 grudnia 2015)
4. K.Pamin, J.Połtowicz "Sposób utleniania fenolu do katecholu i hydrochinonu", zgłoszenie patentowe RP P.415063 (4 grudnia 2015)
5. A.Rugor, M.Szaleniec, T.Janeczko, M.Dymarska, E.Kostrzewa-Susłow "Sposób wytwarzania 17a-metyloandrost-1,4-dien-3-on-17-olu", zgłoszenie patentowe RP P.413208 (23 lipca 2015)
6. A.Rugor, M.Szaleniec, T.Janeczko, M.Dymarska, E.Kostrzewa-Susłow "Sposób wytwarzania octanu androst-1,4,6-trien-3-on-17-olu", zgłoszenie patentowe RP P.413207 (23 lipca 2015)
7. A.Rugor, M.Szaleniec, T.Janeczko, M.Dymarska, E.Kostrzewa-Susłow "Sposób wytwarzania propionianu androst-1,4-dien-3-on-17-olu", zgłoszenie patentowe RP P.413209 (23 lipca 2015)
8. A.Rugor, M.Szaleniec, J.Staroń "Sposób otrzymywania 25-hydroksylowanej witaminy D3 (kalcyfediolu)", zgłoszenie patentowe RP P.415451 (22 grudnia 2015)
9. M.Szaleniec, A.Rugor, A.Dudzik, M.Tataruch, K.Szymańska, A.Jarzębski "Sposób otrzymywania 25-hydroksylowanych pochodnych sterolowych, w tym 25-hydroksy-7-dehydrocholesterolu", zgłoszenie patentowe RP P.411750 (25 marca 2015)



## UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH 2015

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

1. Z.Adamczyk "Protein Adsorption - A new paradigm", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology IEEE NANO 2015, Rome 2015
2. T.Borowski, M.Quesne, A.Mińczewska, Z.Wojdyła, A.Wójcik "Reaction mechanisms of mononuclear metalloenzymes", Conf. Modeling Interactions in Biomolecules VII, Prague 2015
3. J.Heider, M.Szaleniec "Oxygen-independent hydrocarbon hydroxylation reactions by molybdenum enzymes: ethylbenzene dehydrogenase and family", 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015
4. J.Korecki "Structural and electronic properties of ultrathin iron oxide films on Pt(111): from FeO to Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>", COST Action CM1104 WG1+WG2 Workshop, Kraków 2015
5. J.Korecki "Spektro-mikroskopia z użyciem miękkiego promieniowania X w 'Solaris'", 43. Zjazd Fizyków Polskich, Kielce 2015
6. M.Kujda, Z.Adamczyk; "Physicochemical characteristics of albumin dimer and its monolayers", Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
7. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Kirpsza, M.Witko "Catalytic activity of selected heteropolyacids. Theory vs. experiment", Conf. 'Multiscale phenomena in molecular matter', Krakow 2015
8. P.Nowak, M.Mosiąlek, G.Nawrat "Corrosion of magnesium and its alloys - new observations and ideas"; 18. Ogólnopolskie Symp. Naukowo-Techniczne APCS-2015 'Nowe Osiągnięcia w Badaniach i Inżynierii Korozyjnej', Poraj 2015
9. T.Pańczyk, P.Wolski, Ł.Kończak "Nanorurki węglowe jako nośniki leków. Projektowanie na podstawie modelowania molekularnego", Konf. 40 lat Chemii Teoretycznej na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej - Rozwój i Badania, Lublin 2015
10. M.Quesne "Utilizing QM/MM techniques in the study of enzyme catalysed reaction mechanisms", 3<sup>rd</sup> Scientific Workshop of the COST Action CM1305 "Explicit control over spin states in technology and Biochemistry, Belgrade 2015
11. M.Quesne "How can theoretical techniques inform us of the chemistry of real world catalysts", RSC Inorganic Reaction Mechanisms Discussion Group Meeting, Manchester 2015
12. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, R.Tokarz-Sobieraj, J.Korecki, B.Szafran, A.Duschl, P.Queipo "Developing Nanotechnology Curricula to Meet Industry and Society Needs", EuroNanoForum 2015, Riga 2015

13. B.Sulikowski "Zeolites, nanoclusters and related mesoporous materials: an insight from solid-state NMR spectroscopy standpoint", 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
14. M.Szaleniec, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, A.Rugor, M.Tataruch "Bacterial dehydrogenases from *S. denitrificans* – biocatalytic tools for modification of sterols and steroids", Workshop on Agricultural Biotechnology and Biocatalysis, Warszawa 2015
15. M.Szaleniec, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, A.Rugor, M.Tataruch, M.Wasylewski "Steroid C25 dehydrogenase – a novel catalyst for regioselective hydroxylation of cholesterol and its derivatives", World Congr. on Beneficial Microbes: Food, Pharma, Aqua & Beverages Industry, Valencia 2015
16. M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider "Czy modelowanie teoretyczne jest wiarygodnym narzędziem do badania reaktywności enzymów?", 42. Ogólnopolska Szkoła Chemii 'Chemia z głębi ziemi', Lubenia 2015
17. K.Szczepanowicz, G.Para, L.Szyk-Warszyńska, K.A.Wilk, P.Warszyński "Role of surfactant/polymer complex in the formation of nanocapsules", Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD)', D.Exerowa Symp.', Sofia 2015
18. T.Ślęzak, A.I.Chumakov, A.Kozioł-Rachwał, R.Ruffer, N.Spiridis, M. Ślęzak, M.Zajac, J.Korecki "Resolving the complex spin structures with Nuclear Resonant Scattering", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
19. M.Witko "Woman in Science; whether stereotype or feminism", Humboldt-Kolleg Conf. 'Ethics in Science and Life', Toruń 2015
20. M.Witko "Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN; Związki Kraków-Lublin", Konf. 40 lat Chemii Teoretycznej na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej - Rozwój i Badania, Lublin 2015

## REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z.Adamczyk "Protein Adsorption - a True Story", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
2. Z.Adamczyk "Mechanisms of Nanoparticle Deposition and Stability of Their Monolayers", 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015
3. Z.Adamczyk "Mechanizmy zjawisk adsorpcji i osadzania z fazy ciekłej na powierzchniach stałych", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
4. P.Batys, M.Nosek, P.Weroński "Analiza struktury wielowarstw cząstek koloidalnych", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
5. Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Łukomski "Software for a quantitative assessment of risk of damage to objects vulnerable to climate variations", The Getty Conservation Institute Workshop "Epidemiology - basic ideas applied to museum collections", Waddesdon 2015

6. A.Brątek-Skicki, P.Żeliszewska, M.Cieśla, Z.Adamczyk "Określenie mechanizmu adsorpcji fibrynogenu na nośnikach koloidalnych", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
7. E.Brocławik "Density Functional Theory - basic concepts and applications", Workshop on molecular simulation and drug design, Warszawa 2015
8. E.Brocławik "Electronic structure of bioactive transition metal centers - introduction"; Workshop on molecular simulation and drug design, Warszawa 2015
9. E.Brocławik "Electronic structure of bioactive transition metal centers – advanced topics", Workshop on molecular simulation and drug design, Warszawa 2015
10. E.Brocławik, A.Stępniewski, M.Radoń "Ammonia-modified Co(II) centers in zeolites: spin and electron density redistribution through the CoII-NO bond", 3<sup>rd</sup> Scientific Workshop of the COST Action CM1305 "Explicit control over spin states in technology and Biochemistry, Belgrade 2015
11. E.Brocławik, A.Stępniewski, M.Radoń, K.Góra-Marek "Cobalt sites in zeolites: spin state as the gate controlling charge transfer channels"; 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
12. D.Connell, B.Jachimska, V.A.Ferro, P.Mulheran "Development of a Potential Immunocontraceptive Nanomaterial Using Molecular Dynamics Simulations", Research Presentation Day, Glasgow 2015
13. M.Ćwięka, B.Jachimska "Nondestructive Characterization of Lysozyme Layers on Silica Surface using MP-Surface Plasmon Resonance and Quartz Crystal Microbalance", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
14. M.Ćwięka, B.Jachimska "LSZ adsorption on silica surface using the QCM-D and MP-SPR", Erasmus+ (KA1 – Mobilność edukacyjna) Meeting, Kraków 2015
15. A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Kosydar, W.Rojek, T.Szumelda, M.Kołodziej, E.Bieleńska "Pasywne autokatalityczne rekombinatory wodoru; idea, wady, zalety", Konf. 'Wybrane aspekty bezpieczeństwa elektrowni jądrowej w Polsce', Mądralin 2015
16. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Insight into CpdII oxidation ability towards alcohols and aldehydes – mechanism and ligand effect", 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015
17. M.Elżbieciak-Wodka, K.Kilan, T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, K.Podgórna, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Nanostructured Materials Based On Polyelectrolyte Multilayers", 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015
18. P.Frączek, R.Kozłowski "Hans Memling *Sąd Ostateczny* – warunki środowiska w otoczeniu dzieła i jego stan zachowania", Symp. 'Wokół tryptyku Hansa Memlinga *Sąd Ostateczny*. Standardy ochrony i wypożyczania unikatowych dzieł sztuki', Gdańsk 2015

19. E.I.García-López, G.Marcì, F.R.Pomilla, L.Palmisano, A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka "Comparison between catalytic and photocatalytic activity in gas-solid regime of semiconductor oxides and carbon nanotubes supported Keggin heteropolyacid", 21<sup>st</sup> Int. Symp. on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds, Krakow 2015
20. R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "DFT study of Cr, Mo and W oxide monomers supported on silica", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
21. A.Y.Gyurova, A.Michna, E.Mileva "Self-assembly of four- and two-antennary oligoglycines in the bulk of aqueous medium", COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015
22. K.Jóźwiak, K.Pająk, A.Płazińska, W.Płaziński, I.Wainer "Molecular mechanisms of functional selectivity of fenoterol derivatives towards the  $\beta_2$ -adrenergic receptor", 26<sup>th</sup> Int. Symp. on Pharmaceutical and Biomedical Analysis", Tbilisi 2015
23. A.Kędra, R.P.Socha, J.Gurgul, Z.Starowicz, M.Lipiński, S.M.Hanetho, P.Dahl, T.Kruk, K.Łaba, K.Łątka, P.Warszyński "Wykorzystanie efektu plazmonowego na cząstkach metali do wzbudzenia emisji w konwerterach światła", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
24. A.Kędra, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Zimowska, K.Szczepanowicz, Z.Starowicz, M.Lipiński, K.Łaba, P.Warszyński "Emission of light converters excited by plasmonic particles", 3<sup>rd</sup> Int. Congr. of Energy Efficiency and Energy Related Materials ENEFM2015, Oludeniz 2015
25. A.Kędra, P.Warszyński, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, J.Gurgul, K.Szczepanowicz, M.Zimowska, M.Lipiński, S.M.Hanetho, P.Dahl "Synteza i charakteryzacja konwerterów światła opartych na strukturze perowskitu", 6. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika', Świeradów-Zdrój 2015
26. K.Kilan, G.J.Koper, P.Warszyński "Effect of cross-linking cations on permeation of alginate containing multilayered membranes", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
27. H.W.Klemm, G.Peschel, E.Madej, A.Fuhrich, M.Timm, T.Schmidt, H.-J.Freund "Growth of ultrathin Silica Films on Ru(0001)", 79th Annual Meeting of DPG and DPG-Fruhjahrstagung of the Condensed Matter Section, Berlin 2015
28. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Ruggiero, A.Żelazny, M.Śliwa "Właściwości fizykochemiczne i katalityczne katalizatorów miedziowych w reakcji uwodornienia CO<sub>2</sub> w kierunku eteru dwumetylowego (DME)", 2. Ogólnokrajowa Konf. 'Młodzi Naukowcy w Polsce - Badania i Rozwój', Wrocław 2015
29. D.Kosior, J.Zawała, A.Niecikowska K.Małyś "Influence of surfactant polar group on the colliding bubble attachment to hydrophilic and hydrophobic solids", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015

30. P.B.Kowalczyk, J.Zawała, A.Nieciowska, K.Małyś "Influence of short chain alkyl amine on flotation hydrophobicity and bubble attachment to the quartz surface", 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2015
31. P.B.Kowalczyk, J.Zawała, A.Nieciowska, K.Małyś "Flotation, hydrophobicity and bubble attachment to the quartz surface in the presence of hexyloamine", 3<sup>rd</sup> Int. Conf. on Methods and Materials for Separation Processes SSTP 2015, Karpacz 2015
32. R.Kozłowski "Cementy romańskie: mechanizm wiązania, właściwości, problemy konserwatorskie", Konf. 'Cement w architekturze i sztuce', Toruń 2015
33. R.Kozłowski "Dezynsekcja zbiorów muzealnych w planowanym Centrum Konserwatorsko - Magazynowym w Krakowie", Warsztat Muzeum Narodowego w Krakowie i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów 'Ocena ryzyka w obszarze dziedzictwa kultury', Kraków 2015
34. R.Kozłowski "Wentylacja i ogrzewanie kościołów zabytkowych – niestabilność wilgotnościowa i brudzenie", Warsztat IKiFP PAN i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów 'Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów', Warszawa 2015
35. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Multifunctional hybrid ultrathin polyelectrolyte coatings", 7<sup>th</sup> Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS 2015, Pułtusk 2015
36. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Nanostrukturalne filmy polielektrolitowe jako funkcjonalne powłoki", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
37. M.Krzan, E.Jarek, E.Santini, H.Petkova, V.Ulaganathan, M.Lofti, A.Javadi, F.Ravera, R.Todorov, P.Warszyński, E.Mileva, R.Miller, D.Exerowa, L.Ligierri "Stable and biocompatible particle laden foams – the influence of interfacial properties of the mixed adsorption layer on foam film stability and elasticity", Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD)', D.Exerowa Symp.', Sofia 2015
38. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "Influence of inorganic electrolytes on bubble motion in CTAB and SHS solutions", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
39. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Ligierri, D.Exerowa "Stable and biodegradable aqueous foams for industrial or biomedical applications", COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015
40. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Osadzanie nanocząstek srebra na modyfikowanej powierzchni SiO<sub>2</sub> – badania QCM oraz SEM", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015

41. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "In situ QCM-D investigation of silver nanoparticle monolayer formation on polycation modified surfaces", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
42. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Formation of silver nanoparticle monolayers on PAH modified surfaces- QCM and SEM studies", Wrocławska Konf. Studentów Nauk Technicznych i Ścisłych PUZZEL, Wrocław 2015
43. A.Kupczak, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Łukomski "Risk index calculator – a software tool for a quantitative assessment of risk of physical damage to objects vulnerable to climate variations", 1<sup>st</sup> Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, London 2015
44. A.Kupczak, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, M.Łukomski, A.Działo, R.Kozłowski, "HERIe – oprogramowanie do ilościowej oceny zagrożenia obiektów zabytkowych przez wahania parametrów klimatycznych", 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ' 15', Warszawa 2015
45. M.Kujda, Z.Adamczyk "Physicochemical characteristics of albumin dimer and its monolayers on solid surfaces - electrokinetic studies", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
46. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Kinetics of silver ion release from nanoparticles of controlled surface properties", 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudome 2015
47. M.Łapczyńska, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of the PCL nanoparticles containing neuroprotectants from oil-in-water nanoemulsion by phase inversion emulsification method", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
48. M.Łapczyńska, M.Piotrowski, D.Jantas, P.Warszyński, K.Szczepanowicz "Phase inversion emulsification as a method of synthesis PCL nanoparticles containing neuroprotectants for drug delivery systems", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
49. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, D.Jantas, P.Warszyński "The PCL nanoparticles as neuroprotectants-loaded nanocarriers for brain drug delivery", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
50. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bielańska, B.Napruszewska "Titanium dioxide/silver nanoparticle bilayers prepared in self-assembly processes", 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudome 2015
51. D.Majda, K.Tarach, K.Góra-Marek, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes for characterization of mesoporous SBA-15 silicas", 3<sup>rd</sup> Central and Eastern European Conf. on Thermal Analysis and Calorimetry CEEC-TAC3, Ljubljana 2015

52. M.Mosiąlek, M.Krzan, M.Tatko, E.Bielańska, A.Kędra, A.Michna, E.Czerlunczakiewicz "Composite cathode materials for solid oxide fuel cells", 14<sup>th</sup> E-MRS Conf. 'Composites and ceramic materials - technology, application and testing', Białowieża 2015
53. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska "Określenie konformacji fibrynogenu na podstawie pomiarów adsorpcji mikrocząstek polimerycznych". 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
54. A.Nieciukowska, A.Wiertel, J.Zawała, K.Małyś "Effect of the bubble dimensions and the shape deformation degrees on its coalescence time at free water surface", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
55. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Właściwości utleniające modyfikowanych heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych. Obliczenia DFT", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
56. P.Nowak "Polarization resistance of corroding magnesium alloys", Conf. 'Antykorozja - Systemy-Materiały-Powłoki', Ustroń-Jaszowiec 2015
57. M.Oćwieja "Synteza i stabilność nanocząstek metali oraz ich monowarstw", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
58. M.Oćwieja, A.Gorczyca, E.Pociecha, Z.Adamczyk "The influence of stabilizing agent molecules on the biological activity of silver nanoparticles", 7. Krajowa Konf. Nanotechnologii, Poznań 2015
59. A.Olejniczak, M.Leżańska, A.Pacuła, P.Nowak, J.Włoch, J.P.Łukaszewicz "Hydrogel-based synthesis from sustainable biopolymers of nitrogen-doped mesoporous carbons with high capacitive performance", Annual World Conf. on Carbon - CARBON 2015, Dresden 2015
60. H.Pálková, M.Zimowska, L.Jankovič, B.Sulikowski, E.M.Serwicka J.Madejová "Stability of tetrabutyl-phosphonium and -ammonium modified montmorillonite in inorganic acid", European Clay Conf. Euroclay 2015, Edinburgh 2015
61. K.Pamin, J.Połtowicz, S.Basąg, W.Kubiak, R.Tokarz-Sobieraj "Glycerol as solvent in phenol oxidation with hydrogen peroxide - reaction mechanism", 7<sup>th</sup> Int. Conf. on Green and Sustainable Chemistry; 4<sup>th</sup> JACI/GSC Symp. Tokyo 2015
62. K.Pamin, J.Połtowicz, N.Wolan, R.Tokarz-Sobieraj, A.Adamski "Glycerol as alternative solvent in phenol oxidation catalyzed by macrocyclic metallocomplexes with hydrogen peroxide", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015
63. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Influence of Sidewall Functionalization of Carbon Nanotubes on Adsorption of Magnetic Nanoparticles. Molecular Dynamics Study", 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015
64. T.Pańczyk, P.Wolski, Ł.Kończak "Carbon nanotubes as drug delivery systems. Insights from molecular simulations", 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015

65. G. Para, J.Łuczyński, J.Palus, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of Cleavable Esterquad Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/water Interface", COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015
66. S.Perni, T.Kruk, P.Warszyński, P.Prokopovich "Coating of polymeric materials with silver nanoparticles using LbL for antimicrobial catheters", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
67. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Rolak-Piwowarska, K.Jóźwiak "The influence of the  $\beta$ 2-adrenergic receptor genetic polymorphism on the interactions with agonists. A molecular modeling study", 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
68. W.Płaziński, A.Płazińska, M.Drach "Water-catalyzed mechanism of the ring-opening reaction of glucose". 3<sup>rd</sup> Conf. on Catalysis, Suzhou 2015
69. W.Płaziński, A.Płazińska, M.Drach "Mechanism of the water-assisted ring-opening reaction in hexopyranoses". 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
70. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, J.Korecki, E.Bielańska, P.Warszyński "Synthesis of polyelectrolyte nanocapsules with iron oxide nanoparticles for magnetic targeting", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
71. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, J.Korecki, P.Warszyński "Preparation and characterization of polyelectrolyte nanocapsules with iron oxide nanoparticles for magnetic targeting", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
72. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, J.Korecki P.Warszyński "Synthesis and characterization of Gadolinium-Alginate nanogels for biomedical applications", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
73. M.Radoń, K.Gąssowska, E.Brocławik, J.Szklarzewicz "Spin-state energetics of transition metal complexes: the importance and the challenge", 15<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Banska Bystrica 2015
74. W.Rojek, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Katalizatory chromitowe jako katalizatory reakcji hydrogenolizy alkoholu furfurylowego", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
75. A.Rugor, A.Dudzik, M.Guzik, J.Staroń, T.Janeczko, M.Szaleniec "Biokatalityczna funkcjonalizacja steroli i steroidów", Konf. Life Science Open Space 2015, Kraków 2015
76. A.Rugor, T.Janeczko, A.Dudzik, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szalenie "Selective modifications of steroids and sterols performed by enzymes from *Sterolibacterium denitrificans*", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
77. A.M.Rugor, A.Wójcik, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M.Szalenie "Insight into structure and reactivity of steroid C25 dehydrogenase, a molybdenum enzyme hydroxylating sterols", 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015

78. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj, Ł.Orzeł, G.Stochel "Transmetylacja porfiryn – kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji. Katalityczny wpływ jonów octanowych.", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
79. P.Sazama, J.Janošcova, Ł.Mokrzycki, V.I.Parvulescu, E.Tabor, A.Vondrova, D.Kaucky, P.Klein "Enhancement of density of active sites and reaction rates for acid and redox catalysed reactions over zeolite catalysts", 6<sup>th</sup> CIS Conference on Molecular Sieves and Catalysis, Amantea 2015
80. P.Sazama, L.Mokrzycki, V.I.Parvulescu, E.Tabor, A.Vondrova, D.Kaucky, P.Klein "Enhancement of concentration and functionality of active sites in zeolite based catalysts for acid and redox catalysed reactions", 6<sup>th</sup> Int. Symp. on Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Sunset Resort 2015
81. M.Smolik, A.Marczakiewicz-Lustig, B.Jachimska, A.Sawina, D.Dudek, J.Hartwich, "VLDL5 as a biomarker related to Obesity", 10<sup>th</sup> Białystok Int. Medical Congr. Young Scientists, Białystok 2015
82. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, J.Barbasz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Zależność stanu chemicznego i morfologii powierzchni krzemu od katalizatora użytego do jego teksturyzacji w procesie MAE", 6. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika', Świeradów-Zdrój 2015
83. Z.Starowicz, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, M.Lipiński "Symulacyjne i eksperymentalne badanie plazmonicznych nanocząstek srebra do zastosowań na przedniej stronie cienkowarstwowego ogniwa krzemowego", 6. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika', Świeradów-Zdrój 2015
84. Z.Starowicz, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, M.Lipiński "Wytwarzanie i charakteryzacja struktur plazmonicznych do zastosowań w fotowoltaice", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
85. A.Stępniewski, E.Broclawik, T.Bucko, L.Benco "Spin states of cobalt active sites in zeolites and their influence on the ability of Co centers to activate NO ligand (DFT periodic modeling)", 3<sup>rd</sup> Scientific Workshop of the COST Action CM1305 "Explicit control over spin states in technology and Biochemistry, Belgrade 2015
86. M.Strojecki "Źródła pyłów i ich osiadanie w zabytkowych kościołach – metodyka pomiarów", Warsztat IKiFP PAN i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów 'Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów', Warszawa 2015
87. M.Strojecki "Źródła pyłów i ich osiadanie – studium 'epidemiologiczne' 12 różnych świątyń polskich", Warsztat IKiFP PAN i Narodowego Instytutu Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów 'Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów', Warszawa 2015
88. M.Strojecki, A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Aerosol sources and deposition in the indoor environment of historic churches", European Aerosol Conf., Milano 2015

89. M.Strojecki, A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Particle sources and deposition in the indoor environment of historic churches", 1<sup>st</sup> Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, London 2015
90. B.Sulikowski, K.Onik, M.Gackowski, A.Dziedzicka, P.Warszyński, M.Derewiński "<sup>29</sup>Si and <sup>27</sup>Al NMR studies of protozeolitic nanoclusters and related layered materials", 6<sup>th</sup> Int. Symp. on Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Sunset Resort 2015
91. B.Szafran, P.Wójcik, B.Spisak, K.Griffin, D.Rutkowska-Żbik, P.Queipo, T.Zazdrozny, C.Kiparissides, O.Kammona, F.Ntow, S.Friedrichs, A.Duschl "Who will produce the safe nanomaterials? University teaching content in nanotechnology studies does not match job skill demands in the nanotechnology industry", Int. Congr. on Safety of Engineered Nanoparticles and Nanotechnologies, Helsinki 2015
92. M.Szaleniec, J.Heider "QM/MM study of the ethylbenzene dehydrogenase reaction mechanism", 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015
93. M.Szaleniec, D.Knack, J.Heider "Enzymatic C-C bond formation by benzylsuccinate synthases: a theoretical study of the reaction mechanism", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
94. K.Szczepanowicz "Polielektrolitowe nanokapsułki jako nośniki leków", Konf. Life Science Open Space 2015, Kraków 2015
95. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, A.Karabasz, T.Kruk, J.Bereta, P.Warszyński "Pegylated polyelectrolyte nanocapsules as anticancer drug vehicles for passive targeting", Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015
96. K.Szczepanowicz, A.Z.Karabasz, M.Bzowska, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules – promising drug delivery system", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
97. K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, P.Warszyński "Biocompatible Polymeric Nanoparticles as a Promising Candidates for Drug Delivery", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
98. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, M.Piotrowski, T.Kruk, P.Warszyński, A.Karabasz "Targeted drug delivery systems based on polyelectrolyte nanocapsules", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
99. S.Świątek, B.Jachimska "Studies of bovine  $\beta$ -lactoglobulin isoform adsorption on gold surface using the quartz crystal microbalance", Erasmus+ (KA1 – Mobilność edukacyjna) Meeting, Kraków 2015
100. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Funkcjonalne warstwy wołowej  $\beta$ -laktoglobuliny jako nośniki biomolekuł", 5. Konf. Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2015

101. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Interactions between albumin and dendrimers", Erasmus+ (KA1 – Mobilność edukacyjna) Meeting, Kraków 2015
102. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Oddziaływania albuminy z dendrymermi typu PAMAM", 5. Konf. Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2015
103. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oddziaływania heteropolikwasów modyfikowanych metalami przejściowymi z rozpuszczalnikiem i reaktywnymi formami tlenu", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
104. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko, K.Pamin "Geometric Environment vs. Adsorption Properties of Transition Metal Ions Introduced in HPA. DFT Calculations", 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015
105. G.Trefalt, F.J.Montes Ruiz-Cabello, M.Moazzami-Gudarzi, M.Elzbieciak-Wodka, P.Maroni, C.Labbez, M.Borkovec "Interactions between Charged Surfaces in the Presence of Multivalent Ions: Comparison of Counterions and Coions", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
106. V.Valmacco, M.Elzbieciak-Wodka, G.Trefalt, P.Maroni, M.Borkovec "Tuning the properties of silica surfaces by heat treatment", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
107. P.Warszyński, P.Dyshlovenko "Effect of lateral forces on adsorption and maximal coverage of nanoparticles on oppositely charged interface", WG2,5,5, COST CM1101, Meeting, Marcule 2015
108. P.Warszyński, P.Dyshlovenko "Effect of lateral forces on adsorption and maximal coverage of nanoparticles on oppositely charged interface", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47<sup>th</sup> Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
109. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Charakterystyka monowarstw fibrynogenu na mice przy pomocy metod elektrokinetycznych i wzmocnienia koloidalnego", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
110. P.Weroński, M.Nosek, P.Batys, M.Skoczek "Application of Rotating Disk Electrode Technique in Studies of Supported Thin Films of Spherical Particles", 7<sup>th</sup> Int. Workshop on Surface Modification for Chemical and Biochemical Sensing SMCBS 2015, Pułtusk 2015
111. M.Witko, P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka, U.Filek, A.Kirpsza "Catalytic activity of selected heteropolyacids. Theory vs. experiment", Conf. 'Multiscale phenomena in molecular matter', Krakow 2015
112. M.Wlodek, M.Kolasinska-Sojka, M.Szuwarzynski, Sz.Zapotoczny, R.von Klitzing, P.Warszyński "Effect of supporting cushion materials and deposition conditions on the formation of POPC/POPE lipid bilayers", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015

113. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Formation of POPC/POPE lipid bilayers on polyelectrolyte films. Influence of supporting cushion materials and deposition conditions", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
114. J.Yu, K.Zurcher, G.Schlottig, M.Baum, M.M.Visser Taklo, B.Wunderle, P.Warszyński, T.Brunschwiler "Nanoparticle assembly and sintering towards all-copper flip chip interconnects", IEEE 65<sup>th</sup> Electronic Components and Technology Conf. (IEEE-ECTC), San Diego 2015
115. J.Zawała, S.Dorbolo, K.Małyśa "The bubble bouncing from stagnant and vibrating hydrophilic and hydrophobic solid surfaces", COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015
116. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyśa "On importance of thin liquid films in kinetics of the bubble bouncing and collision with interfaces", Conf. 'Smart and Green Interfaces:Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015
117. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyśa "Modelling of influence of surface mobility on bubble rising velocity and kinetics of three-phase contact formation", Conf. 'Smart and Green Interfaces:Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD), D.Exerowa Symp.', Sofia 2015
118. J.Zawała, K.Małyśa "Influence of surface vibrations on kinetics of the bubble coalescence and attachment", 10<sup>th</sup> Summer School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sandomie 2015
119. J.Zurcher, C.Xi, B.R.Burg, S.Zimmermann, T.Brunschwiler, H.Guo, A.R.Studart, G.Potasiewicz, P.Warszyński "Enhanced thermal underfills by bridging nanoparticle assemblies in percolating microparticle beds", IEEE 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology (IEEE-NANO), Rome 2015
120. J.Zürcher, S.Zimmermann, B.R.Burg, R.Strässle, X.Chen, G.Potasiewicz, P.Warszyński, C.Hofmann, M.Baum, T.Brunschwiler "Enhanced thermal underfills by bridging nanoparticle assemblies in percolating microparticle beds", 20th European Microelectronics and Packaging Conf. & Exhibition (EMPC 2015), Friedrichshafen 2015
121. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero, K.Pamin, A.Kornas, K.Gołąbek "Ag-Cu/M<sub>x</sub>O<sub>y</sub> catalysts for selective glycerol hydrogenolysis: role of the catalyst composition and reaction conditions", 7<sup>th</sup> Int. Conf. on Green and Sustainable Chemistry; 4<sup>th</sup> JACI/GSC Symp. Tokyo 2015

## POSTERY

1. P.Batys, M.Skoczek, P.Weroński "Role of single water molecule in cholesterol condensation effect", 2015 Martini Coarse-Graining Workshop, Groningen 2015
2. P.Batys, P.Weroński, M.Nosek "Synteza i charakterystyka struktury quasi-heksagonalnych monowarstw", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015

3. B.Bożek, M.Oszajca, W.Łasocha "Syntezy nowych molibdenianów", 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015
4. A.Brątek-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Human Fibrinogen Monolayers under Aqueous Conditions", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
5. A.Brątek-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Systematic Study of Human Fibrinogen Adsorption on Negatively Charged Colloidal Particles", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
6. D.Connell, B.Jachimska, V.A.Ferro, P.Mulheran "Physicochemical characterisation and analysis of peptide adsorption onto inorganic surfaces", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
7. J.Cybulska, A.Brzycka, A.Zdunek, K.Woliński "Simulations of enforced structural changes in galacturonic acid molecules", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
8. D.Connell, B.Jachimska, V.A.Ferro, P.Mulheran "Development of a Potential Immunocontraceptive Nanomaterial Using Molecular Dynamics Simulations", Research Presentation Day, Glasgow 2015
9. L.Cristofolini, K.Szczepanowicz, D.Orsi, T.Rimoldi, F.Albertini, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules for hyperthermia", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
10. M.Ćwięka, B.Jachimska "Effective Immobilization of Biological Catalyst: Lysozyme on gold surface", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
11. M.Ćwięka, B.Jachimska "Efektywność adsorpcji lizozymu(LSZ) na powierzchni złota", 5. Konf. Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków 2015
12. M.Ćwięka, B.Jachimska "The effect of the solution pH on the lysozyme immobilization at the gold surface", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
13. M.Ćwięka, B.Jachimska "Interaction of lysozyme with silica surface: molecular rearrangements", Konf. 'Horyzonty Nauki: Giełda Prac Dyplomowych', Kraków 2015
14. M.Ćwięka, K.Kubiak-Ossowska, P.Mulheran, B.Jachimska "Experimental and Theoretical Methods as a Tool for the Interpretation of Lysozyme Immobilization at a Silica Surface", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
15. M.Dobrzański, T.Ślęzak, M.Zajac, I.Miotkowski, J.Korecki, N.Spiridis, D.G.Merkel, M.Sikora, M.Waśniowska, Z.Kąkol, Z.Tarnawski, A.Kozłowski "Nuclear inelastic scattering and nuclear forward scattering studies of <sup>57</sup>Fe adatoms dynamics and magnetism on top of topological insulator Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
16. K.Drabczyk, R.P.Socha, G.Mordarski, A.Skwarek, "Investigation of the Copper Deposition on Screen Printed Front Electrode of Solar Cell", 38<sup>th</sup> Int. Spring Seminar on Electronics Technology ISSE 201 'Novel Trends in Electronics Manufacturing', Eger 2015

17. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Oxidation of alcohols and aldehydes by Compound II mimics - energetic pathways and ligand effect", 17<sup>th</sup> Int. Symp.on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, Utrecht 2015
18. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Insight into Cpd II oxidation ability towards aldehydes: energetic pathways and ligand effect", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
19. P.Dubiela, P.Humeniuk, S.Pfeifer, M.Bublin, T.Borowski, K.Hoffmann-Sommergruber "Specificity of non-specific lipid transfer proteins and influence of the ligands on their three-dimensional structure", 6<sup>th</sup> Int. Symp. on Molecular Allergology ISMA 2015, Lisbon 2015
20. A.Dudzik, A.Rugor, M.Tataruch, M.Szaleniec "Optimization of catalytic synthesis of hydroxylated cholesterol derivatives by steroid C25 dehydrogenase", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
21. R.Dula, B.Napruszewska, D.Mucha, E.Bieleńska, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Destrukcja struktury hydrotalkitów Mn-Al w czasie składowania - wpływ na właściwości mieszanych tlenków otrzymanych w wyniku kalcynacji", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
22. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Socha "Uwodornienie acetolu w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury w obecności katalizatorów rutenowych naniesionych na mezoporowatą krzemionkę typu SBA-15", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
23. K.Durczyk, B.Sulikowski "Ultrastabilny zeolit typu Y: otrzymywanie i właściwości katalityczne w transformacjach  $\alpha$ -pinenu", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
24. K.Durczyk, B.Sulikowski "Physicochemical and catalytic properties of ultrastable zeolite Y specimens", 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
25. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Izomeryzacja  $\alpha$ -pinenu na modyfikowanym naturalnym klinoptylolicie", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
26. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Catalytic and physicochemical properties of modified natural clinoptilolite specimens", 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
27. M.Elżbieciak-Wodka, M.Kolasińska-Sojka, P.Nowak, P.Warszyński "Tuning the permeability and thickness properties of polyelectrolyte multilayer films: linear vs. exponential growth", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
28. K.Freindl, M.Zajac, N.Spiridis, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "Oxygen adsorption on Fe(110) revisited", 12<sup>th</sup> European Conf. on Surface Crystallography and Dynamics, Trieste 2015

29. M.Gackowski, K.Onik, Ł.Kuterasiński, A.Dziedzicka, K.Durczyk, J.Podobiński, B.Sulikowski, M.Derewiński "Protozeolitic clusters embedded into layered and macroporous structures as catalysts for the liquid phase reactions", 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
30. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Deposition of zeolite nanoparticles onto porous silica monolith", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
31. M.Gackowski, K.Szczepanowicz, E.Bielańska, P.Warszyński, M.Derewiński "Silica monolith with deposited nanoparticles of zeolites", 12<sup>th</sup> Int. Conf. on Materials Chemistry, York 2015
32. K.Gołabek, A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero, K.Pamin, A.Kornas, K.Góra-Marek "Ag-Cu/M<sub>x</sub>O<sub>y</sub> catalysts for selective glycerol hydrogenolysis: role of the catalysts composition and reaction conditions", 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
33. A.Gonzalez Giellen, K.Luberda-Durnaś, M.Oszajca, W.Łasocha "Hybrid Organic-Inorganic Material ZnS(p-Xylylnadamine)1/2", 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015
34. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, B.Dembińska, P.J.Kulesza, E.Bielańska, M.Ruggiero "The effect of Nafion ionomer on electroactivity of palladium-polypyrrole catalysts for the oxygen reduction reaction", 66<sup>th</sup> Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Tajpei 2015
35. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, B.Dembińska, P.J.Kulesza, E.Bielańska, M.Ruggiero "The effect of Nafion ionomer on electroactivity of palladium-polypyrrole catalysts for the oxygen reduction reaction", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
36. J.Gurgul, E.Młyńczak, A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, T.Ślęzak, J.Korecki "Coercivity enhancement in CoO/Fe bilayer system", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
37. J.Gurgul, M.Zimowska, K.Łątka, D.B.Napruszewska, R.P.Socha "<sup>57</sup>Fe Mössbauer spectroscopy studies of the nature and environment of iron species in porous Clay heterostructures", 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015
38. B.Jachimska, M.Ćwięka, S.Świątek, K.Tokarczyk "Structure and Properties of Protein Layers: From Biomolecules to a Functional Surface", 23<sup>rd</sup> Int. Symp.on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Malmö 2015
39. B.Jachimska, K.Tokarczyk "Immobilization of PAMAM dendrimers on solid support", 23<sup>rd</sup> Int. Symp.on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Malmö 2015
40. D.Jantas, M.Piotrowski, M.Leśkiewicz, M.Regulska, P.Warszyński, W.Lasoń "Neuroprotective activity of (bio)polyelectrolyte-coated nanocapsules containing Cyclosporine A", Conf. 'Mechanisms of neurodegeneration 2015', Heidelberg 2015

41. R.Karcz, P.Klein, V.Pashkova, S.Sklenak, J.Dedecek "Dystrybucja atomów glinu w sieci krystalicznej zeolitu TNU-9", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
42. A.Kędra, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Zimowska, K.Szczepanowicz, Z.Starowicz, M.Lipiński, K.Łaba, P.Warszyński "Emission of light converters excited by plasmonic particles", 3<sup>rd</sup> Int. Congr. of Energy Efficiency and Energy Related Materials ENEFM2015, Oludeniz 2015
43. A.Kędra, R.P.Socha, M.Zimowska, L.Szyk-Warszyńska, P.Panek, J.Barbasz, P.Warszyński "Comparison of metallic and bimetallic catalysts for silicon surface texturization", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
44. A.Kirpsza, U.Filek, A.Micek-Ilnicka, E.Lalik "Weryfikacja użyteczności reakcji konwersji alkoholi jako reakcji modelowych do oznaczania kwasowości katalizatorów stałych", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
45. M.Kołodziej, R.Kosydar, E.Lalik, T.Szumełda, D.Duraczyńska, J.Gurgul, M.Ruggiero A.Drelinkiewicz "Rola brązów  $H_xMoO_3$  i  $H_yWO_3$  w selektywności uwodorniania  $C=O/C=C$  w aldehydach nienasyconych na katalizatorach Pd", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
46. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Sidewall Functionalization of Magnetically Triggered Nanocontainer by Colloid Nanoparticles and Amide Groups. A Molecular Dynamics Study", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
47. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Sidewall functionalization of carbon nanotubes as a method of controlling structural transformations of the magnetically triggered nanocontainer. A molecular dynamics study", 16<sup>th</sup> Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes NT15, Nagoya 2015
48. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Interaction of Carbon Nanotube with Gold Nanoparticles Covered by pH-cleavable Hydrazone Linkers. Molecular Dynamics Study", 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015
49. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Computational study of a nanocontainer composed of carbon nanotube and gold nanoparticles covered by pH-cleavable hydrazone linkers", 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Symp. PTBI, Lublin 2015
50. A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Oddziaływanie małego klastra miedzi z cząsteczkami wodoru – obliczenia DFT", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
51. M.Kozieł, M.Gryl, W.Łasocha "Nietypowe połączenie koordynacyjne  $\{Zn_2(1,3pn)_6Cl_4\}$ ", 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015
52. A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, B.Matlak, K.Matlak, J.Korecki "Growth and magnetic properties of ultrathin epitaxial FeO films and Fe/FeO bilayers on MgO(001)", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015

53. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, R.P.Socha, P.Nowak, P.Warszyński "Conductive hybrid polyelectrolyte coatings with reduced graphene oxide", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
54. T.Kruk, A.Pajor-Świerzy, L.Szyk-Warszyńska, R.Socha, P.Warszyński "Functional ultrathin polyelectrolyte coatings formed with reduced graphene oxide and Prussian Blue nanoparticles as a sensitive tool for H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> detection", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
55. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Multifunctional polyelectrolyte thin films for nanomedicine", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
56. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Multifunctional polyelectrolyte ultrathin coatings for biomedicine applications", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
57. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński "Bubble motion in ionic surfactants solutions – influence of various inorganic electrolytes", COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015
58. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Ligierri, D.Exerowa "The influence of the colloidal particles presence on the foam film stability and elasticity", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
59. M.Krzan, H.Petkova, E.Santini, E.Jarek, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Ligierri, D.Exerowa "Stable and biocompatible particle laden foams and interfacial properties of the mixed adsorption layer", 5<sup>th</sup> Int. Conf. on Biofoams, Sorrento 2015
60. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "In situ QCM-D investigation of silver nanoparticle monolayer formation on polycation modified surfaces", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
61. K. Kubiak, Z. Adamczyk, M. Oćwieja "Kinetics of silver nanoparticle deposition on PAH-modified surfaces -QCM and SEM studies", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
62. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Silver nanoparticle monolayers on PAH modified surfaces: QCM and SEM studies", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
63. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska, M.Oćwieja "Silver nanoparticle deposition on PAH and fibrinogen monolayers", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
64. M.Kujda, Z.Adamczyk, "Physicochemical studies of synthetic cross-linked albumin dimer", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47<sup>th</sup> Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015

65. M.Kujda, M.Morga, Z.Adamczyk, E.Kowalska "Charakterystyka porównawcza właściwości fizykochemicznych monomeru i dimeru albuminy ludzkiej", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
66. Ł.Kuterasiński, M.Gackowski, E.Włoch, J.Kryściak-Czerwenka, K.Durczyk, A.Dziedzicka, E.Bielańska, M.Derewiński "Distinction of Brønsted acid sites in MFI type borates", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
67. E.Lalik, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, T.Szumelda, E.Bielańska "Thermokinetic oscillation in recombination of hydrogen and oxygen on Pd-based catalysts", Konf. 'Wybrane aspekty bezpieczeństwa elektrowni jądrowej w Polsce', Mądralin 2015
68. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Hydrogen and oxygen recombination reaction on SiO<sub>2</sub> and MoO<sub>3</sub> supported bimetallic Pd-Pt catalysts", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
69. E.Lalik, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Reakcja rekombinacji wodoru i tlenu w obecności katalizatorów bimetalicznych Pd-Pt na nośnikach SiO<sub>2</sub> i MoO<sub>3</sub>", Konf. 'Wybrane aspekty bezpieczeństwa elektrowni jądrowej w Polsce', Mądralin 2015
70. Ł.Lewicki, B.Sulikowski "Ultrastabilne zeolity typu Y jako katalizatory transformacji węglowodorów z klasy terpenów", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
71. M.Leżańska, A.Pacula, A.Olejniczak, J.P.Łukaszewicz "Physicochemical characterisation of new carbons prepared from chitosan using uniform spherical silica particles as a template", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
72. M.Lipiński, F.Granek, M.Palewicz, Z.Starowicz, R.P.Socha, A.Kędra "Influence of the metallic nanoparticles on the organic solar cells properties", European Congr. and Exhibition on Advanced Materials and Processes EUROMAT 2015, Warszawa 2015
73. M.Lipiński, G.Kulesza-Matlak, Z.Starowicz, K.Gawlińska, Ł.Major, R.P.Socha, A.Kędra "Opto-electronic properties of the nanostructures made of PbS, organic-inorganic perovskites and plasmonic metal nanoparticles", E-MRS Spring Meeting, Lille 2015
74. M.Lipiński, G.Kulesza-Matlak, Z.Starowicz, Ł.Major, R.Major, R.P.Socha, A.Kędra "Investigation of the nanocomposite structures based on the organic-inorganic halide perovskite materials and plasmonic metal nanoparticles", European Congr. and Exhibition on Advanced Materials and Processes EUROMAT 2015, Warszawa 2015
75. M.Lipiński, R.P.Socha, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, Z.Starowicz, Ł.Major, K.Drabczyk, K.Gawlińska, K.Łaba "Perovskite nanoparticles used as light converter for solar cell", Conf. Microtechnology and Thermal Problems in Electronics MICROTHERM 2015, Łódź 2015
76. K.Luberda-Durnaś, A.Gonzalez Guillen, M.Oszajca, W.Łasocha "X-Ray Diffraction as the Useful Tool for Synthesis Optimization", 57. Konferencja Krystalograficzna, Wrocław 2015 [ISBN 978-83-939559-4-7]

77. K.Luberda-Durnaś, A.Gonzalez Guillen, M.Oszajca, W.Łasocha "Hybrid organic-inorganic material -  $\text{ZnS}(\text{m-xylylenediamine})_{1/2}$ ", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
78. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna suspensji oraz monowarstw nanocząstek srebra osadzonych na powierzchniach stałych", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
79. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Release of silver ions from nanoparticles stabilized by low-molecular-weight organic compounds", Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
80. M.Łapczyńska, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, E.Bieleńska, P.Warszyński "Synthesis of nanoparticles containing neuroprotective agents from nanoemulsions by organic solvent evaporation method", 5<sup>th</sup> Int. Colloids Conf. Amsterdam 2015
81. M.Łapczyńska, M.Piotrowski, D.Jantas, P.Warszyński, K.Szczepanowicz "Synthesis of the PCL nanoparticles containing neuroprotectants as efficient (brain) drug delivery systems", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
82. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "The Neuroprotectant Loaded PCL Nanocarriers as Efficient Drug Delivery Across the Blood-Brain Barrier", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
83. M.Łapczyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of nanoparticles containing low-soluble active agents using sonicated-assisted layer-by-layer (SLbL) technology", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
84. W.Łasocha, A.Borowiec, W.Nitek, P.Serda, A.Rafalska-Łasocha "Nowe peroksozwiązki  $\text{Mo(VI)}$  z kwasami nikotynowym i pikolinowym", 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015
85. W.Łasocha, M.Oszajca, A.Szymańska, K.Pamin, J.Połtowicz "Badania fizykochemiczne i katalityczne molibdenianów aniliny i jej pochodnych", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
86. W.Łasocha, M.Oszajca, A.Szymańska, K.Pamin, J.Połtowicz "Nowe związki polioksomolibdenowe jako katalizatory procesów epoksydacji", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
87. W.Łasocha, A.Rafalska-Łasocha, A.Borowiec "New Peroxo-compounds of  $\text{Mo(VI)}$ . Completeness of Structural Research by Powder Diffraction Studies", 29<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting, Rovinj 2015
88. A.Maciej, A.Wadas, M.Sowa, R.Socha, W.Simka "Anodic Oxidation of Galvanic Zn-Ni Alloy Coatings in Selected Alcoholic Solutions", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015

89. A.Maciej, A.Wadas, K.Szymańska, R.Socha, W.Simka "Colorizing of Zn-Co Alloy Coatings Treated Anodically in Alcoholic Solutions", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
90. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bielańska, B.Napruszewska "Otrzymywanie biwarstw ditlenek tytanu/nanocząstki srebra w procesie kontrolowanej dyfuzji", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
91. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bielańska, B.Napruszewska "Preparation of titanium dioxide/silver nanoparticle bilayers under diffusion-controlled processes", Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
92. J.Maciejewska, M.Sadowska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Nanoparticle monolayers on colloid carrier particles", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
93. D.Majda, K.Mlekodaj, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes in comparison with other methods of characterization of the mesoporous SBA-15 silica", 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015
94. D.Majda, K.Tarach, K.Góra-Marek, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Thermoporosimetry of n-alkanes for characterization of mesoporous SBA-15 silicas", 3<sup>rd</sup> Central and Eastern European Conf. on Thermal Analysis and Calorimetry CEEC-TAC3, Ljubljana 2015
95. G.Marcì, E.I.García-López, M.Bellardita, F.R.Pomilla, L.Palmisano, A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka "Confronto tra attività catalitica e fotocatalitica dell'eteropoliacido di Keggin H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> supportato su ossidi o su nanotubi di carbonio", 6<sup>th</sup> Workshop Nazionale AICIng Molecules and materials: chemistry for engineering, Rome 2015
96. A.Michna, Z.Adamczyk, P.Batys "Revealing the Formation and Stability of PDADMAC Monolayers on Mica via Electrokinetic and Colloid Enhancement Techniques", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
97. A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Strojecki "Źródła pyłu zawieszonego i jego osiadanie w Kościele Mariackim w Krakowie w kontekście konserwacji ołtarza Wita Stwosza", 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ'15', Warszawa 2015
98. E.Młyńczak, B.Matlak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, N.Spiridis, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Magnetic exchange coupling effects observed in Fe/CoO bilayers and Fe/CoO/Fe trilayers epitaxially grown on MgO(001)", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
99. G.Mordarski, R.Socha, E.Lalik "Electrical measurements during oscillatory sorption of hydrogen in palladium powder", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
100. M.Morga, Z.Adamczyk, D.Kosior "A Quantitative determination of silica monolayer formation and stability; *in situ* streaming potential studies", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015

101. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Electrokinetic characteristics of poly-L-lysine monolayers on mica", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
102. M.Mosiąlek, J.Michalska, W.Simka, R.P.Socha, W.Dec, M.Jaworska-Kik "The effect of sulphate-reducing bacteria biofilm on passivity and corrosion resistance of 2205 duplex stainless steel", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
103. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Determining mechanism of fibrinogen and human albumin adsorption on mica via AFM, SEM and optical microscopy", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
104. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Wasilewska "Wyznaczenie konformacji białka (fibrinogenu) na podstawie pomiarów adsorpcji cząstek koloidalnych", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
105. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Kujda, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Charakterystyka konformacji białek przy użyciu wzmocnienia koloidalnego". 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
106. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Kujda, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Fibrinogen and Human Serum Albumin Monolayer Characterization by Colloid Deposition", 79<sup>th</sup> Prague Meeting on Macromolecules 'Functional Polymers at Bio-Material Interfaces', Prague 2015
107. E.Niedziałkowska, M.Szaleniec "Expression, purification and characterization of steroid C25 dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans* in *E. coli* expression system", 9<sup>th</sup> Molybdenum and Tungsten Enzymes Conf., Balatonfured 2015
108. E.Niedziałkowska, M.Szaleniec "Heterologous expression of steroid C25 dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans* - a MGD, FeS and hem containing heterotrimer", Conf. 'Multi-Pole Approach to Structural Science', Warszawa 2015
109. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Teoretyczny opis właściwości redoksowych układów Cu-HPA", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
110. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, K.Pamin "Wpływ gliceryny jako jednego z ligandów na adsorpcję reagentów tlenowych na wybranych kationach metali przejściowych", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
111. P.Nowak, M.Bobruk, T.Wieczorek, Ł.Nieużyła, G.Nawrat "Equivalent electrical circuit of corroding magnesium alloy electrodes", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
112. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Adsorption of Tannic Acid on Polyelectrolyte Monolayers Determined by *in situ* Streaming Potential Measurements", 79<sup>th</sup> Prague Meeting on Macromolecules 'Functional Polymers at Bio-Material Interfaces', Prague 2015

113. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, D.Lupa "Mechanisms of silver ion and nanoparticle release from antibacterial coatings", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
114. M. Oćwieja, A. Gorczyca, E. Pociecha "The influence of silver nanoparticles of controlled surface properties on physiological state of *Triticum aestivum* seedlings", Conf. Suspensions - designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
115. J.Olszówka, E.Bielańska, D.Napruszewska, R.Karcz, E.M.Serwicka "Benign catalytic oxidation of cyclohexanone to  $\epsilon$ -caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite catalysts", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015
116. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bielańska, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Utlenianie cykloheksanonu do  $\epsilon$ -kaprolaktonu przy pomocy nadtlenu wodoru na katalizatorach hydrotalkitowych o różnym stopniu krystaliczności", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
117. Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Żbik, K.Sidor, M.Świrski, R.van Eldik, L.Fiedor, G.Stochel "Tuning of the stability of the photosynthetic magnesium complexes on the biosynthetic pathway", 21<sup>st</sup> Int. Symp. on the Photophysics and Photochemistry of Coordination Compounds, Krakow 2015
118. M.Oszajca, A.Kmak, W.Łasocha, "Badania strukturalne połączeń typu MXY(amina)Z na bazie proszkowych danych dyfrakcyjnych", 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015
119. A.Pacuła, M.Ruggiero-Mikołajczyk, E.Bielańska "Nitrogen-doped carbon materials derived from Mg-Mn-Al layered double hydroxides and acetonitrile as electrode materials", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
120. A.Pacuła, R.P.Socha, E.Bielańska "Nitrogen-doped carbon materials derived from Mg-Fe-Al layered double hydroxides and acetonitrile as electrocatalysts for oxygen reduction reaction", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
121. K.Pamin, A.Ładocha, S.Basąg, W.Kubiak, J.Połtowicz "Elektrochemiczne badanie właściwości soli metali przejściowych kwasów fosfomolibdenowego i fosforowolframowego", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
122. K.Pamin, J.Połtowicz "Keggin-type heteropolianions and their hybrids with porphyrin as catalysts for Baeyer-Villiger oxidation", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015
123. K.Pamin, J.Połtowicz, R.Grabowski "Aktywność katalityczna kationowych metaloporfiryn w reakcji utleniania fenolu nadtlaniem wodoru w obecności gliceryny", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
124. K.Pamin, J.Połtowicz, R.Grabowski, J.Kryściak-Czerwenka "Spectroscopic and catalytic studies of Keggin-type iron heteropolyacids in  $H_2O_2$  phenol oxidation", 3<sup>rd</sup> Int. Symp. on Green Chemistry, La Rochelle 2015

125. K.Pamin, J.Połtowicz, M.Prończuk, E.M.Serwicka "Sole żelazowe heteropolikwasów fosforowolframowego i fosforomolibdenowego jako katalizatory reakcji utleniania cykloheksanonu do cyklolaktonu tlenem molekularnym", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
126. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Release mechanism of cisplatin from carbon nanotube capped by magnetic nanoparticles. A molecular dynamics study", 16<sup>th</sup> Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes NT15, Nagoya 2015
127. G.Para, E.Jarek, J.Łuczynski, K.A.Wilk, P.Warszyński "Surface activity of esterquat surfactants - influence of hydrolysis", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
128. G.Para, J.Łuczynski, J.Palus, E.Jarek, K.A.Wilk, P.Warszyński "Adsorption of Cleavable Esterquad Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/water Interface", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
129. P.Pasierb, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, D.Duraczyńska, M.Kołodziej, A.Dziedzicka "Synthesis of Pd catalysts with the use of CeO<sub>2</sub> doped Sr as supports and their application in the hydrogenation of cinnamaldehyde", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
130. E.Pięta, N.Piergies, B.Boduszek, T.K.Olszewski, M.Nattich-Rak, E.Proniewicz "Potential-dependent SERS investigation of the adsorption of (diphenylphosphoryl)(pyridin-2-yl) methanol on Ag, Au and Cu electrodes", 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Advanced Vibrational Spectroscopy ICAVS, Vienna 2015
131. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Evaluation of neuroprotective action of nanoencapsulated model drugs", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
132. A.Łazińska, W.Łaziński, K.Jóźwiak "The beta2-adrenergic receptor conformation and the ligand association/dissociation characteristics", Conf. 'Membrane Signalling and Transport: Computation and Experiment', Oxford 2015
133. A.Łazińska, W.Łaziński, K.Jóźwiak "On the prediction of the stereochemistry-dependent characteristics of ligand-receptor interactions, Conf. 'Membrane Signalling and Transport: Computation and Experiment', Oxford 2015
134. A.Łazińska, W.Łaziński, K.Jóźwiak "The conformation of the beta2-adrenergic receptor and its influence on the ligand association/dissociation characteristics", 4<sup>th</sup> Int. Workshop on Expression, Structure and Function of Membrane Proteins, Firenze 2015
135. W.Łaziński, A.Łazińska, M.Drach "Modeling of the stereochemistry-dependent interactions between beta2-adrenergic receptor and its agonist ligands", 4<sup>th</sup> Int. Workshop on Expression, Structure and Function of Membrane Proteins, Firenze 2015
136. W.Łaziński, A.Łazińska, M.Drach "QM/MM study on the mechanism of the glucose ring-opening reaction", 15<sup>th</sup> Int. Congr. of Quantum Chemistry, Beijing 2015

137. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, A.Dudzik, M.Szaleniec, P.Warszyński "Matryce alginianowe jako nośnik komórek bakterii E.coli w katalizie enzymatycznej", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
138. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, P.Warszyński "Magnetically responsive polyelectrolyte nanocapsules as a carriers of therapeutic compounds", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
139. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, W.Węglarz, E.Bielańska, P.Warszyński "Gadolinium-Alginate nanobeads for theranostic application", 5<sup>th</sup> Int. Colloids Conf. Amsterdam 2015
140. G.Potasiewicz, K.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Cytotoxic Activity of Paclitaxel incorporated polyelectrolyte nanocapsules", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
141. G.Potasiewicz, K.Szczepanowicz, T.Kruk, E.Bielańska, P.Warszyński, B.R.Burg, J.Zurcher, S.Zimmermann, T.Brunschwiler "Formation of capillary-bridges by sol-gel technique with flexible additions and with embedded nanoparticles for thermal joints", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
142. G.Potasiewicz, K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński, B.R.Burg, J.Zurcher, S.Zimmermann, T.Brunschwiler "Formation of capillary-bridges by sol-gel technique with embedded nanoparticles for thermal joints", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
143. M.Procner, Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Żbik "Cobalamin and folic acid as carriers of potential chemotherapeutic agents based on ruthenium", 21<sup>st</sup> Int. Symp. on the Photophysics and Photochemistry of Coordination Compounds, Krakow 2015
144. M.Procner, Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Żbik, G.Stochel "Kobalamina i kwas foliowy jako nośniki kompleksów rutenu(II) o potencjalnych właściwościach przeciwnowotworowych", 2. Ogólnopolskie Symp. Biomedyczne ESKULAP, Lublin 2015
145. J.Radoń, A.Kupczak, A.Sałęga, K.Wąs, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "New WUFI®Plus module for modelling indoor climate and energy consumption in museums, libraries and archives", 1<sup>st</sup> Int. Conf. on Science and Engineering in Arts, Heritage and Archaeology, London 2015
146. A.Rafalska-Łasocha, M.Bednarz, D.Sarkowicz, Z.Kaszowska, A.Szymańska, W.Łasocha "X-Ray Powder Diffraction Investigations of the Components of Groud Layer in Works by Henryk Siemiradzki", 57. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2015
147. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak-Nowak, Z.Kaszowska, M.Bednarz, W.Łasocha "XRPD w badaniach składu barokowych zapraw malarskich", 15. Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków ACHWOZ' 15', Warszawa 2015
148. M.Rogowska, A.Michalik-Zym, E.Bielańska, R.Dula, D.Napruszewska, P.Nowak, E.M.Serwicka, A.Gaweł, K.Bahranowski "Comparison of inverse microemulsion method and conventional pillaring in synthesis of transition metal oxide/montmorillonite nanocomposites", European Clay Conf. Euroclay 2015, Edinburgh 2015

149. M.Rogowska, A.Michalik-Zym, D.Napruszewska, E.Bielańska, P.Nowak, E.M.Serwicka "TiO<sub>2</sub>/montmorillonite composites as photocatalysts for degradation of cationic and anionic dyes", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
150. W.Rojek, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, D.Rutkowska-Żbik "Katalizatory chromitowe jako katalizatory reakcji hydrogenolizy alkoholu furfurylowego", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
151. M.Ruggiero, G.Mordarski "Porównanie własności elektrochemicznych elektrod Au i Pt w wysokotemperaturowym jednokomorowym ogniwie paliwowym z elektrolitem stałym", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
152. M.Ruggiero, M.Tatko, M.Mosiałek, A.Kędra, P.Nowak, E.Bielańska "Sm<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>-La<sub>0.6</sub>Sr<sub>0.4</sub>FeO<sub>3</sub> catalyst for the oxygen reduction reaction for solid oxide fuel cells: synthesis and properties", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
153. M.Ruggiero-Mikołajczyk, G.Mordarski, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Żelazny, A.Kornas "Porównanie własności elektrochemicznych elektrod Au i Pt w wysokotemperaturowym jednokomorowym ogniwie paliwowym z elektrolitem stałym", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
154. A.Rugor, A.Wójcik, S.Mordalski, A.Bojarski, M.Szaleniec "MD and QM:MM studies of steroid C25 dehydrogenase catalytic subunit", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
155. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, R.Tokarz-Sobieraj, J.Koreck, "Developing Nanotechnology Curricula to Meet Industry and Society Needs", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
156. D.Rutkowska-Żbik, Ł.Orzeł, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko, G.Stochel, "Kwantowo-chemiczny opis oddziaływań kompleksów metali przejściowych z kobalaminą", Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
157. D.Rutkowska-Żbik, Sz.Wojtyła, M.Buchalska, W.Macyk "Wybrane kompleksy Ti(IV) jako sensybilizatory w układach fotokatalitycznych i ogniwach fotowoltaicznych typu DSSC: Właściwości spektroskopowe", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
158. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of colloid superstructure formation", 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology IEEE NANO 2015, Rome 2015
159. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk "Mechanism of nanoparticle deposition on polystyrene latex particles revealed by electrokinetic, AFM and SEM measurements". 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
160. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska "Revealing human Fb monolayer conformations at different pHs", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015

161. K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Kornas, R.P.Socha, K.Góra-Marek, M.Ruggiero, D.Rutkowska-Żbik, J.-F.Paul, D.Mucha, A.Żelazny "Reakcja uwodornienia CO<sub>2</sub> do metanolu na katalizatorach Cu/ZrO<sub>2</sub> – rola odmiany polimorficznej ZrO<sub>2</sub> oraz stanu elektronowego miedzi", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
162. P.Sazama, L.Mokrzycki, B.Wichterlova, G.Sadovska, V.I.Parvulescu, J.Dedecek, J.Janoscova, P.Klein "Unprecedented Acid and Redox Activity of Template-free Al-rich BEA Zeolite", Int. Symp. on Zeolite and Microporous Crystals 2015, Sapporo 2015
163. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński "Molecular dynamics study of phospholipid bilayers with high cholesterol content", Gordon Research Conf. 'Mechanisms of Membrane Transport', Lewiston 2015
164. M.Skoczek, P.Batys, P.Weroński "Symulacje dynamiki molekularnej błony prostasomu", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
165. M.Skoczek, M.Nosek, T.Piecha, P.Weroński, E.Luchter-Wasylewska "Voltammetric monitoring of prostatesome aggregation and self fusion", Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
166. R.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, J.Gurgul, P.Panek "The surface chemistry of silicon etched with Au and Pd metallic and bimetallic catalysts", 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015
167. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, P.Warszyński "The surface chemistry of silicon etched with metallic and bimetallic catalysts", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
168. K.Sofińska, Z.Adamczyk "Quantitative adsorption of IgG on colloidal particles as a new method for preparation of low-cost immunoassays", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
169. N.Spiridis, K.Freindl, E.Madej, P.Dróżdź, D.Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki "The structure and phase composition of iron oxides on Pt(111)", 12<sup>th</sup> European Conf. on Surface Crystallography and Dynamics, Trieste 2015
170. N.Spiridis, K.Freindl, E.Madej, D.Wilgocka-Ślęzak, P.Dróżdź, J.Korecki "Magnetic properties of ultrathin iron oxide films on Pt(111)", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
171. Z.Starowicz, A.Kędra, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, M.Lipiński "Simulation and experimental investigations on plasmonic silver nanoparticles for the cell front side application", E-MRS Spring Meeting, Lille 2015
172. A.Śtepniewski, T.Bučko, E.Broclawik, L.Benco, M.Radoń, K.Góra-Marek "Interaction of NH<sub>3</sub> and NO with cobalt sites in chabazite: insight from DFT molecular dynamics simulations"; 20. Forum Zeolitowe, Stryszawa 2015

173. B.Sulikowski, K.Onik, M.Gackowski, A.Dziedzicka, P.Warszyński, M.Derewiński "<sup>29</sup>Si and <sup>27</sup>Al NMR studies of protozeolitic nanoclusters and related layered materials", 6<sup>th</sup> Int. Symp. on Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Sunset Resort 2015
174. M.Szaleniec, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, A.Rugor, M.Tataruch "Bacterial dehydrogenases from *S. denitrificans* - biocatalytic tools for modification of sterols and steroids", Workshop on Agricultural Biotechnology and Biocatalysis, Warszawa 2015
175. M.Szaleniec, A.Dudzik, E.Niedziałkowska, A.Rugor, M.Tataruch, M.Wasylewski "Steroid C25 dehydrogenase - a novel catalyst for regioselective hydroxylation of cholesterol and its derivatives", World Congr. on Beneficial Microbes: Food, Pharma, Aqua & Beverages Industry, Valencia 2015
176. K.Szczepanowicz, L.Cristofolini, T.Rimoldi, D.Orsi, F.Albertini, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules for hyperthermia", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
177. K.P.Szczepanowicz, A.Karabasz, M.Bzowska, P.Warszyński "Polyelectrolyte nanocapsules as a drug carrier for targeted cancer therapy", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
178. K.Szczepanowicz, T.Kruk, A.Bzowska, A.Karabasz, P.Warszyński "Emulsion droplets with polyelectrolyte shell as nanocapsules for targeted delivery of anticancer drugs", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
179. K.Szczepanowicz T.Kruk, A.Karabasz, M.Bzowska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Pegylated polyelectrolyte nanocapsules as drug carries", 5<sup>th</sup> Int. Colloids Conf. Amsterdam 2015
180. K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Thin Films as the 'Antifouling' Coatings Protecting Against Non-specific Proteins Adsorption, Bacteria and Fungi Colonization", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47<sup>th</sup> Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
181. K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, K.Podgórna, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, P.Warszyński "Encapsulation of clozapine in polyelectrolyte nanocapsules and their interactions with macrophage cell line", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
182. K.Szczepanowicz, P.Piechota, W.P.Węglarz, P.Warszyński "Oil core polyelectrolyte nanocapsules containing iron oxides as imaginable magnetically responsive drug delivery system", 4<sup>th</sup> Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Sitges 2015
183. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, T.Kruk, M.Piotrowski, M.Łapczyńska, S.Łukasiewicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as Promising Drug Delivery System", 20<sup>th</sup> Int. Symp. on Microencapsulation, Boston 2015
184. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, W.Węglarz, E.Bieleńska, P.Warszyński "Preparation of Gadolinium-alginate nanogels for theranostic application", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015

185. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, J.Gurgul, A.Pacula, E.Bielańska, M.Ruggiero "An effect of the type of metal component in the PdM/C (M = Au, Ir, Pt, Ru) catalysts on control of C=O/C=C hydrogenation in cinnamaldehyde", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
186. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, T.Ślęzak, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
187. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Spiridis, R.P.Socha, T.Ślęzak, M.Zajac, M.Stankiewicz, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Prospects of X-ray Photoemission Electron Microscopy at the first beamline of Polish synchrotron SOLARIS", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015
188. M.Ślęzak, T.Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, B.Matlak, P.Dróżdź, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Pilet, J.Raabe, J.Korecki "Oscillating magnetic anisotropy in epitaxial Co/Fe(110) films on W(110)", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
189. M.Śliwa, B.Marszałek, M.Strzempek, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Badania oddziaływań materiałów MOF z substancjami o właściwościach terapeutycznych", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
190. S.Świątek, B.Jachimska "Bovine  $\beta$ -lactoglobulin layers on gold surface: Role of ionic strength", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
191. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Studies of the functional layers of  $\beta$ -lactoglobulin as biomolecules carriers", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
192. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Adsorpcja izoform wołowej  $\beta$ -laktoglobuliny z zastosowaniem mikrowagi kwarcowej QCM-D", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
193. S.Świątek, J.I.Loch, K.Lewiński, B.Jachimska "Mechanism of bovine  $\beta$ -lactoglobulin isoforms adsorption on gold surface", Konf. 'Horyzonty Nauki: Giełda Prac Dyplomowych', Kraków 2015
194. K.A.Tarach, K.Góra-Marek, J.Tekla, U.Filek, W.Makowski "Ethanol dehydration process regarding acidic properties and type of mesoporous structure of zeolites ZSM-5", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
195. M.Tataruch, E.Luchter-Wasylewska, M.Szaleniec "Immobilizowana dehydrogenaza etylobenzenowa – molekularne rzędnice do syntezy optycznie czystych alkoholi", 1.Konf. Naukowa 'Enzymy w nauce i przemyśle ENZYMOS', Lublin 2015
196. M.Tataruch, K.Szymańska, A.Jarzębski, A.Dudzik, M.Szaleniec "Synteza alkoholi chiralnych przy zastosowaniu reaktora przepływowego z immobilizowaną dehydrogenazą fenyloetanolową", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015

197. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Investigation of interaction between PAMAM dendrimers and SiO<sub>2</sub> surface", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
198. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Understanding the mechanism of dendrimer adsorption onto oppositely charged surfaces using Surface Plasmon Resonance and Quartz Crystal Microbalance techniques", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
199. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Analysis of the PAMAM dendrimers-BSA complexes adsorption using QCM-D and MP-SPR techniques", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
200. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Determination of the impact of PAMAM dendrimers on serum albumin", Konf. 'Horyzonty Nauki: Gielda Prac Dyplomowych', Kraków 2015
201. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Multifunctional macromolecules (G6 PAMAM dendrimers) as potential candidates for application to catalysis", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
202. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Właściwości redoksove heteropolikwasów modyfikowanych miedzią. Obliczenia DFT", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
203. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, U.Filek "Redox properties of modified Cu-HPA", 17<sup>th</sup> Int. Symp.on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, Utrecht 2015
204. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, U.Filek, M.Witko "Redox properties of modified Cu-HPA", 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015
205. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, M.Witko "Properties of modified molybdenum and tungsten heteropolycids. DFT calculations vs. experimental results", 17<sup>th</sup> Int. Symp.on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, Utrecht 2015
206. V.Ulaganathan, G.Gochev, M.Krzan, S.S.Dukhin, C.Gehin-Delval, R.Miller "Effect of pH and salt concentration on velocity of rising bubbles in Beta-Lactoglobulin solution", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
207. V.Ulaganathan, G.Gochev, M.Krzan, S.S.Dukhin, C.Gehin-Delval, R.Miller "Effect of pH and salt concentration on velocity of rising bubbles in Beta-Lactoglobulin solution", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
208. P.Warszyński, G.Para, J.Łuczyński, J.Palus, E.Jarek, K.A.Wilk "Adsorption of Cleavable Esterquat Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/Water Interface", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
209. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak "Properties of fibrinogen monolayers on mica - electrokinetic and colloid deposition studies". 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015

210. M.Wasylewski, A.Dudzik, M.Jemioła-Rzemińska, M.Szaleniec "Calorimetric and computational study of the catalytic mechanism of 1-(S)-phenylethanol dehydrogenase", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
211. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska "Charakterystyka monowarstw fibrynogenu na mice przy pomocy metod elektrokinetycznych i wzmocnienia koloidalnego". Conf. Suspensions -designing, synthesis, properties, application SUSPENS, Krakow 2015
212. P.Weroński, P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek "Effective diffusivity of colloidal particle multilayers", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
213. P.Weroński, P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek "Synthesis and quantitative characterization of non-conductive colloidal particle multilayers", 2015 AEESP Research and Education Conf. New Haven 2015
214. A.Węgrzynowicz, J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Biełańska "Otrzymywanie monowarstw nanocząstek hematytu na powierzchni miki na drodze procesów samoorganizacji", Sem. 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS', Kraków 2015
215. D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozłowski, T.Kołodziej, T.Gieła, M.Ślęzak, N.Spiridis, J.Raabe, N.Pilet, J.Korecki "Temperature evolution of the surface magnetic domain structure in single crystalline magnetite", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
216. D.Wiśnios, A.Kiejna, J.Korecki "First principles study of the adsorption of MgO molecules on a clean Fe(001) surface", 22<sup>nd</sup> Int. Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Kraków 2015
217. M.Włodek, R.von Klitzing, M.Kolasinska-Sojka, P.Warszyński "An influence of cushion material on the formation of supported lipid bilayer", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
218. M.Włodek, M.Kolasinska-Sojka, P.Warszyński "POPC/POPE lipid vesicles deposition on polyelectrolyte films", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
219. M.Włodek, M.Kolasinska-Sojka, P.Warszyński "Supported POPC/POPE lipid bilayer modified with quantum dots", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
220. M.Włodek, M.Kolasinska-Sojka, P.Warszyński "Incorporation of quantum dots into lipid bilayers supported on polyelectrolyte multilayers", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
221. Z.Wojdyła, T.Borowski "DFT study of nitroxygenase activity of manganese quercetin 2,3-dioxygenase", Winter School of Theoretical Chemistry, Helsinki 2015
222. J.Wojewoda-Budka, A.Wierzbička-Miernik, L.Lityńska-Dobrzynska, M.Szczerba, G.Mordarski, M.Mosiąlek "Microstructure characteristics and phase transformation after heat treatment of the Ni-P and Ni-Re-P coatings electroless deposited", 4<sup>th</sup> Int. Symp. on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków 2015

223. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics study of Doxorubicin interaction with suspensions of modified carbon nanotubes", 15<sup>th</sup> European Student Colloid Conf., Krakow 2015
224. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics study of Congo red interaction with carbon nanotubes", 16<sup>th</sup> Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes NT15, Nagoya 2015
225. P.Wolski, T.Pańczyk, "Modeling of adsorption of organic dyes on single walled carbon nanotube", 9<sup>th</sup> Int. Symp. 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-9', Wrocław 2015
226. P.Wolski, T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of adsorption of organic dyes on single walled carbon nanotube", 7. Konwersatorium Chemii Medycznej & 8. Sympozjum PTBI, Lublin 2015
227. J.Zawała, D.Kosior, T.Dabros, K.Małyś "Modelling of surface-active substance influence on kinetics of the bubble collision and attachment to hydrophobic surface, presence – experiments and numerical simulation", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
228. J.Zawała, D.Kosior, T.Dabros, K.Małyś "Influence of the bubble surface fluidity on collision kinetics and attachment to hydrophobic solids", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
229. J.Zawała, D.Kosior, K.Małyś "Influence of non-slip/slip hydrodynamic boundary conditions at solid surface on attachment of the colliding bubble", 15<sup>th</sup> Conf. of Int. Assoc. of Colloid and Interface Scientists and 47th Conf. of the German Colloid Society, Mainz 2015
230. J.Zawała, K.Małyś "Kinetics of the bubble collisions at resting and vibrating water/gas and water/solid interfaces", 58. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk 2015
231. J.Zawała, A.Nieciowska, K.Małyś "Influence of an air bubble impact velocity on its rupture time at water/air interface – experiments and simulations", COST Action MP1106 'Smart and green interfaces - from single bubbles and drops to industrial, environmental and biomedical applications (SGI)', Belgrade 2015
232. J. Zawała, A. Nieciowska, K. Małyś, "Kinetics of the bubble collisions and rupture at resting and vibrating liquid/gas and liquid/solid interfaces – experiment and modelling", 29<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS, Bordeaux 2015
233. J.Zawała, A.Nieciowska, K.Małyś "Influence of bubble size on its coalescence time at water surface – experiments and simulations", 6<sup>th</sup> Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces, Potsdam/Golm 2015
234. J.Zawała, A.Nieciowska, A.Wiertel, K.Małyś "Influence of liquid surface tension and viscosity on rising bubble coalescence at resting and vibrating liquid/gas interfaces", Conf. 'Smart and Green Interfaces: Fundamentals and Diagnostics (SGI-FunD)', D.Exerowa Symp.', Sofia 2015

235. M.Zimowska, J.Gurgul, K.Łątka, L.Matachowski, R.Dula, J.Kryściak-Czerwenka, J.Pulit, R.P.Socha "Wpływ dystrybucji Fe w sieci porowatych heterostruktur ilastych typu PCH na aktywność w katalitycznym rozkładzie etanolu", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
236. M.Zimowska, Z.Olejnyczak, L.Lityńska-Dobrzyńska, J.Gurgul, R.P.Socha, K.Łątka "Structure investigation of Fe doped Porous Clay Heterostructures derived from Laponite", 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015
237. M.Zimowska, J.Olszówka, J.Gurgul, K.Łątka, E.M.Serwicka "Physicochemical and catalytic properties of the tin doped porous clay heterostructures", European Clay Conf. Euroclay 2015, Edinburgh 2015
238. M.Zimowska, J.Olszówka, J.Gurgul, K.Łątka, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Porowate heterostrukтуры ilaste na osnowie Laponitu - wpływ dotowania cyną na właściwości fizykochemiczne i katalityczne", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
239. M.Zimowska, H.Pálková, L.Jankovič, J.Madejová, E.M.Serwicka "Organiczne pochodne minerałów ilastych jako nośniki i stabilizatory nanocząstek metalicznych", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
240. S.Zimowski, M.Zimowska, "Abrasive wear resistant study of hard coatings by ball-cratering and ballon-disc methods", 16<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA, Granada 2015
241. A.Żelazny, K.Samson, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas "Optymalizacja warunków reakcji hydrogenolizy glicerolu do glikolu propylenowego dla serii katalizatorów AgCu/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>", 47. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2015
242. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Revealing adsorption mechanism of human fibrinogen on positively charge latex", 40<sup>th</sup> FEBS Congr. 'The Biochemical Basis of Life', Berlin 2015
243. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk "Human fibrinogen monolayers on colloid carrier particles of various charge", IEEE 15<sup>th</sup> Int. Conf. on Nanotechnology (IEEE-NANO), Rome 2015

## **WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH**

1. P.Batys "Surface and transport properties of nanoparticle multilayers", Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego UJ, Kraków 2015
2. E.Broclawik "Struktura kobaltowych centrów aktywnych w materiałach mikroporowatych a ich nieoczekiwane właściwości katalityczne", Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH, Kraków 2015
3. M.Góral-Kurbiel "Polish Women in Science", Kochi University, Kochi 2015

4. M.Góral-Kurbiel, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, P.Kulesza, J.Gurgul, M.Ruggiero, E.Bielańska "Electroreduction of O<sub>2</sub> on Pd,Pt-based catalysts for fuel cell applications & influence of heteropolyacids on the catalytic activity", Kochi University, Kochi 2015
5. B.Jachimska "High speed medical diagnostic-Fluid doctor", University of Cambridge, 2015
6. E.Jarek "Nanochemia i koloidy w konserwacji", Akademia Sztuk Pięknych, Kraków 2015
7. R.Kozłowski "Mikroklimat w otoczeniu tryptyku Hansa Memlinga *Sąd Ostateczny*", Muzeum Narodowe w Gdańsku, 2015
8. W.Łasocha "Historia, osiągnięcia i perspektywy rozwoju rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej", Instytut Fizyki, PAN, Warszawa 2015
9. M.Mosiąlek "Oxygen reduction reaction at the selected electrodes studied by electrochemical impedance spectroscopy", Wydział Fizyki Uniwersytetu w Wilnie, Wilno 2015
10. E.Niedziałkowska "Characterisation of steroid C25 dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans*", University of Virginia, Charlottesville 2015
11. T.Pańczyk "Molecular dynamics simulations of proton transverse relaxation times in suspensions of magnetic nanoparticles", Laboratoire fuer Physikalische Chemie, ETHZ, Zurich 2015
12. W.Płaziński "Ring inversions in hexopyranoses: from QM calculations to sampling of stretched polymer conformation", Joined IGC Seminar, ETHZ, Zurich 2105
13. W.Płaziński "Ring inversions in hexopyranoses: kinetics, free energies and influence on the glycosidic linkage geometry", Joined IGC Seminar, ETHZ, Zurich 2105
14. W.Płaziński "Water-catalyzed mechanisms of the ring-opening reaction of glucose", Joined IGC Seminar, ETHZ, Zurich 2105
15. D.Rutkowska-Żbik "Nanotechnology curricula to meet industry and society needs", webinarium GoToWebinar, 2015
16. E.Serwicka "Catalysts derived from layered minerals for abatement of volatile organic compounds", Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, Kraków 2015
17. E.Serwicka "Design of mesoporous silica supports derived from layered silicate minerals", Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, Kraków 2015
18. P.Warszyński "Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polimerowe i mikroenkapsulacja", Wydział Chemii UJ, Kraków 2015
19. P.Weroński "Modeling of colloidal particle deposition", Institute for Health and Consumer Protection, EU Joint Research Centre, Ispra 2015

## SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

### WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. C.Bertolin (Institute of Atmospheric Sciences and Climate CNR, Padova) Instytutu Nauk o Atmosferze i Klimatu CNR w Padwie wygłosi referat pt. "History" of Climate Change: study of the past records to understand recent climate change.
2. M.Comor (Vinca Institute of Nuclear Sciences, Beograd) "Synthesis, modification and photocatalytic activity of titania-based nanomaterials"
3. J.Datka (Wydział Chemii UJ) "Zastosowanie spektrometrii IR do badań zeolitów cz.1 centra kwasowe i zasadowe"
4. J.Datka (Wydział Chemii UJ) "Zastosowanie spektrometrii IR do badań zeolitów cz.2 kationy Cu, Ni, Co"
5. J.Grau-Bove (University College London) "CFD simulation of PM deposition in indoor heritage"
6. P.Gryglaszewski (Politechnika Krakowska) "Zwyczaj i tradycje Świąt Bożego Narodzenia w dworze polskim" [wykład bożonarodzeniowy]
7. A.Horzela (Instytut Fizyki Jądrowej PAN) "Moment olśnienia na Helgoland – 90 lat mechaniki kwantowej" [wykład inauguracyjny Międzynarodowego Studium Doktoranckiego]
8. J.Majewski (Los Alamos Neutron Scattering Center) "Neutron Scattering from Interfaces"
9. P.J.Sides (Carnegie Mellon University, Pittsburgh) "On the measurements of streaming potential arising from axially symmetric flows and the determination of zeta potential therefrom"
10. M.Thommes (Quantachrome Instruments) "Advances in the textural characterization of nanoporous materials with hierarchical pore structure"
11. J.L.Toca-Herrera (Institute for Biophysics University of Natural Resources and Life Sciences, Vienna) "Function and mechanical properties of biomaterials at the nano and microscale"
12. W.Zajac (Instytut Fizyki Jądrowej PAN) "Fizyk o Całunie Turyńskim – krytyczny przegląd nowej literatury" [wykład wielkanocny]
13. E.Zholkovskyy (Institute of Bio-Colloid Chemistry National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv) "The cell model approach in electrodynamics, fluid mechanics and electrokinetics"
14. E.Zholkovskyy (Institute of Bio-Colloid Chemistry National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv) "Spreading of solute in Electroosmotic Flow"

## **WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU**

1. T.Borowski "Omówienie wyników ankiety HR"
2. R.Kosydar, T.Szumelda "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacje uczestników mobilności z pobytów na Uniwersytecie Aston w Birmingham w Wielkiej Brytanii"
3. M.Krzan "Projekt systemowy NCBiR 'Wsparcie zarządzania infrastrukturą badawczą beneficjentów działań 2.1 i 2.2 POIG'"
4. M.Krzan "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacja uczestnika mobilności z wyjazdu na szkolenie do Instytutu Chemii Fizycznej Bułgarskiej Akademii Nauk oraz na Uniwersytet w Liège w Belgii"
5. W.Płaziński "Symulacje heksopiranoz metodą dynamiki molekularnej: problemy i perspektywy"
6. A.Pacula "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+"
7. A.Pomianowski "O istocie pojęć niezwilżalności oraz hydrofobowości"
8. M.Ruggiero-Mikołajczyk "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacja uczestnika mobilności z pobytu na Uniwersytecie w Santiago de Compostela"
9. T.Wałowicz "Zasady BHP związane z właściwym postępowaniem z odczynnikami, odpadami chemicznymi oraz wykorzystaniem kontenera do przechowywania odczynników"

## **WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU**

1. J.Barbasz "Nauka na ekranie - co naprawdę widzimy"
2. E.Jarek "Biomimetyka - przyroda inspirowa naukowców"
3. W.Łasocha "Człowiek a kryształy - czy można odkryć coś co nie powinno istnieć"
4. D.Rutkowska-Żbik, T.Borowski "Fizyka i chemia pod wodą"
5. J.Szaleniec, M.Szaleniec "Zrozumieć i stworzyć - jak projektujemy leki"

## **UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE**

### **DOKTORA HABILITOWANEGO**

1. M.Łukomski "Analiza mikrouszkodzeń w obiektach zabytkowych przy użyciu metod optycznych i akustycznych" (Akademia Górniczo-Hutnicza)
2. D.Rutkowska-Żbik "Kwantowo-chemiczne badania właściwości i reaktywności wybranych pochodnych porfiryn"

## DOKTORA

1. P.Batys "Surface and Transport Properties of Nanoparticle Multilayers" (promotor P.Weroński)
2. J.Dziedzic "Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami" (promotor P.Warszyński)
3. A.Dziedzicka "Modyfikowane klinoptylolity naturalne jako katalizatory transformacji  $\alpha$ -pinenu" (promotor B.Sulikowski)
4. M.Gackowski "Monolity krzemionkowe z naniesionymi nanocząstkami zeolitu jako modelowe mikroreaktory przepływowe" (promotor M.Derewiński)
5. Ż.Kalemba-Jaje "Transtryfikacja triglicerydów metanolem w obecności stałych polimerowych katalizatorów kwasowych" (promotor A.Drelinkiewicz)
6. K.Kilan "Multilayer polyelectrolyte films as functional membranes and coatings in application for molecular biomedicine" (promotor P.Warszyński)
7. K.Kubiak "Stabilność monowarstw nanocząstek srebra na powierzchniach granicznych - badania AFM oraz QCM" (promotor Z.Adamczyk)
8. M.Kujda "Ilościowa charakterystyka elektrokinetyczna monowarstw białek globularnych oraz ich oddziaływań z ligandami jonowymi" (promotor Z.Adamczyk)
9. A.Kupczak "Wielowymiarowa analiza struktur wodorków metali celem udoskonalenia możliwości ich zastosowania w energetyce wodorowej" (Akademia Górniczo-Hutnicza - promotor W.Sikora)
10. Ł.Kuterasiński "Natura protonowych centrów kwasowych w zeolitach typu MFI izomorficznie podstawionych borem" (promotor M.Derewiński)
11. A.Mińczewska "Badania nad strukturą i mechanizmem katalitycznego działania wybranych metaloenzymów niehemowych" (promotor T.Borowski)
12. P.Niemiec "Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów" (promotor R.Tokarz-Sobiera)
13. K.Onik "Nowe materiały hierarchiczne oparte na nanoklasterach zeolitów jako podstawa nowoczesnych układów katalitycznych" (promotor M.Derewiński)
14. M.Piotrowski "Evaluation of neuroprotective action of nanoencapsulated inhibitors of intracellular biochemical cascades" (promotor P.Warszyński)
15. A.Rugor "Oksydoreduktazy ze *Sterolibacterium denitrificans* jako biokatalizatory do reakcji utleniania pochodnych sterolowych" (promotor M.Szaleniec)
16. M.Skoczek "Surface Properties of Prostatomes" (promotor P.Warszyński)

17. K.Sofińska "Opis oddziaływań w układach antygen-immunoglobuliny przy pomocy metod elektrolitycznych oraz pomiarów AFM" (promotor Z.Adamczyk)
18. M.Tataruch "Immobilizacja i procesowe wykorzystanie dehydrogenaz użytecznych w przemyśle farmaceutycznym" (promotor M.Szaleniec)
19. M.Tatko "Nowe materiały na osnowie tlenków metali ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych ogniach paliwowych" (promotor P.Nowak)

## **KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT**

1. 47. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków, 16-18 marca 2015 (B.Sulikowski)
2. 15th European Student Colloid Conference, Kraków, 8-11 czerwca 2015 (P.Warszyński)
3. Seminarium 'Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i Spektroskopia SERS', Kraków, 2-3 lipca 2015 (Z.Adamczyk)
4. 9th International Symposium 'Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids', Wrocław, 7-23 lipca 2015 (M.Witko, R.Tokarz-Sobieraj)
5. 4th International Symposium on Surface Imaging / Spectroscopy at the Solid / Liquid Interface, Kraków, 2-4 września 2015 (P.Warszyński)
6. Polish-American Innovation Bridge PAIB/PAMI: How to begin, Kraków 20-21 września 2015 (B.Jachimska)
7. Workshop 'Suspensions – designing, synthesis, properties, application SUSPENS', Kraków, 25 września 2015 (Z.Adamczyk)
8. Warsztat "Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów", Warszawa, 13 listopada 2015 (R.Kozłowski)

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

1. Festiwal Nauki "Oświeć się!", Rynek Główny, Kraków 20-23 maja 2015 (N.Spiridis)
2. Dzień Otwarty I KiFP PAN, Kraków, 6 listopada 2015 (R.Kozłowski)

## **NAGRODY**

1. Pierwsza nagroda w konkursie PROPAN 2015 za najbardziej prodoktorancki instytut PAN w drugiej edycji konkursu organizowanego przez Krajową Reprezentację Doktorantów i Samorząd Doktorantów PAN
2. Wyróżnienie dla najbardziej prodoktoranckiego instytutu PAN w Wydziale III PAN

3. R.Tokarz-Sobieraj, Medal "Zasłużonym dla Politechniki Rzeszowskiej im. Ignacego Łukasiewicza" za zasługi dla rozwoju Politechniki Rzeszowskiej
4. W.Płaziński, stypendium naukowe dla wybitnych młodych naukowców Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego
5. A.Brątek-Skicki, Marie Skłodowska-Curie Individual Fellowships (2015-2017) Komisji Europejskiej

## WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

Wypis 3/92/2016

**z protokołu 92. posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk – V. posiedzenia kadencji 2015-2018 w dniu 25.02.2016, dotyczący sprawozdania z działalności naukowej Instytutu w roku 2015**

### Ad. 10. Sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu w roku 2015

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

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

Prof. Tomasz Borowski poinformował Radę, że działalność statutowa Instytutu została podsumowana na seminarium sprawozdawczym Instytutu, które odbyło się 5 lutego 2016, a następnie przedstawił i omówił:

- a) rodzaje projektów badawczych, realizowanych w ubiegłym roku w Instytucie, wraz ze źródłami ich finansowania: NCN (31), NCBiR (3), MNiSW (3), fundusze strukturalne UE (3), 7 program ramowy UE (3), projekty programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej (3), projekty na podstawie umów dwustronnych (1), COST (4, w tym jeden koordynowany przez Instytut),
- b) funkcjonowanie i współpracę w ramach KNOW,
- c) dorobek naukowy Instytutu:

|                                                                        |     |
|------------------------------------------------------------------------|-----|
| – rozdziały w książkach                                                | 7   |
| – artykuły w czasopismach międzynarodowych (JCR, lista A)              | 94  |
| – artykuły w innych czasopismach (lista B i C)                         | 8   |
| – inne publikacje                                                      | 15  |
| – streszczenia w materiałach konferencyjnych                           | 311 |
| – wydawnictwa nakładem Instytutu (materiały konferencyjne – abstrakty) | 2   |
- i jego porównanie z latami poprzednimi oraz patenty i zgłoszenia patentowe,
- d) udział pracowników w konferencjach naukowych i wykładach,
- e) uzyskane tytuły i stopnie naukowe,
- f) otrzymane nagrody,
- g) zorganizowane konferencje naukowe,
- h) zorganizowane imprezy popularno-naukowe,
- i) główne osiągnięcia naukowe w roku 2015:
  - opracowanie nowego pola siłowego do symulacji węglowodanów,
  - określenie siły oddziaływania w niemodyfikowanych chemicznie układach koloidalnych z wykorzystaniem spektroskopii sił,
  - opracowanie składu katalizatorów do przeróbki alkoholu furfurylowego w kierunku bio-komponentów do paliw i tworzyw sztucznych.

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

- dobrej kondycji naukowej Instytutu, o czym świadczy ilość i jakość powstających w Instytucie prac naukowych oraz kwalifikacje kadry naukowej Instytutu,
- udziału studiów doktoranckich w harmonijnym kształceniu kadry w Instytucie, których poziom podkreślają wyróżnienia studium doktoranckiego jakie zostały przyznane Instytutowi,
- roli dwóch projektów dotyczących studiów doktoranckich prowadzonych przez Instytut (MOLMED, ISD), które zaowocowały również zwiększoną mobilnością młodych kadr naukowych i sprzyjały integracji środowiska naukowego.

Przewodnicząca Rady, zamykając dyskusję zaproponowała wniosek stwierdzający, że Rada przyjmuje sprawozdanie z działalności Instytutu w roku 2015 w formie i treści przedstawionej przez dr hab. Tomasza Borowskiego, Dyrektora ds. naukowych Instytutu. W jawnym głosowaniu oddano 20 głosów za przyjęciem wniosku i sprawozdania.

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