



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



**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2016**



Kraków, marzec 2017

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2016	9
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2016	13
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2016	19
Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący	19
Działalność statutowa Instytutu	23
Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"	57
Projekty badawcze NCN "Sonata"	63
Projekty badawcze NCN "Opus"	73
Projekty badawcze NCN "Preludium"	89
Projekty badawcze NCN "Fuga"	95
Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"	99
Projekty badań stosowanych NCBiR	103
Projekty NCBiR "Lider"	107
Projekty Akcji COST UE	111
Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej	117
Inne międzynarodowe projekty badawcze	121
Projekty Programu Erasmus+	125
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2016	129
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	129
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	163
Raport International Advisory Board 2014-2016	195
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	199

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 2016 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 2016 roku studia trzeciego stopnia - studia doktoranckie w ramach Międzynarodowych Studiów Doktoranckich (MSD), działających w porozumieniu z Wydziałem Chemicznym Politechniki Rzeszowskiej.

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 był 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 2016

Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący (MNiSW)

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

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1. Nowe źródła energii; materiały i procesy. Procesy katalityczne z udziałem bio-surowców 27
2. Nowe perokso- oraz poliookso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania 28
3. Katalityczne układy tlenkowe do otrzymywania produktów o wysokiej wartości dodanej - komponentów paliw i tworzyw sztucznych 29
4. Uwodornienie acetolu w obecności katalizatorów metalicznych na nośnikach mikro- i mezoporowatych 30
5. Heteropolizwiązki jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do kaprolaktonu tlenem molekularnym 31
6. Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych 32
7. Aktywność fotokatalityczna kompozytów typu minerał warstwowy/tlenek metalu przejściowego 33
8. Nowe kompozytowe materiały katodowe do wysokotemperaturowych ogniw paliwowych 34
9. Enzymatyczne procesy utleniania i redukcji 35

Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria

10. Fizykochemia heteropolizwiązków i ich katalityczne właściwości w konwersji alkoholi. Obliczenia DFT vs. eksperyment 39
11. Materiały o zróżnicowanej strukturze porowatej: synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne, badania spektroskopowe i modelowanie kwantowo-chemiczne 40
12. Właściwości strukturalne, elektronowe i dynamika powierzchni i nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultrawysokiej próżni 41
13. Badania wpływu parametrów mikroskopowych i fizykochemicznych na możliwość kontroli właściwości układów o potencjalnym znaczeniu biomedycznym 43

Nanostruktury materii miękkiej

14. Topologia i właściwości elektrokinetycznych monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe: Określenie konformacji białek osocza krwi na podstawie pomiarów potencjału przepływu oraz adsorpcji nanocząstek metali szlachetnych i mikrocząstek polimerycznych 47
15. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych 48
16. Wpływ energii kinetycznej na kinetykę koalescencji pęcherzyków na swobodnej powierzchni czystych cieczy 49
17. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe 51

Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

18. Modelowanie warunków środowiska i zużycia energii w budynkach przechowujących zasoby dziedzictwa kultury 55

KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty badawcze NCN "Sonata Bis"

1. ST4 [2013-2017] Wspomagane komputerowo projektowanie i przewidywanie właściwości nośników leków opartych na strukturze nanorurek węglowych 59
2. NZ1 [2015-2020] Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu w biosyntezie alkaloidów o aktywności farmakologicznej – struktury, mechanizmy reakcji i racjonalne przeprojektowywanie enzymów 60
3. ST4 [2016-2020] Pole siłowe mechaniki molekularnej dla badania struktury, dynamiki oraz konformacji węglowodanów zawierających jednostki furanozowe 61

Projekty badawcze NCN "Sonata"

1. ST5 [2011-2016] Nowe katalizatory Pd-Pt/nanokompozyt hybrydowy do redukcji tlenu w polimerowym ogniwie paliwowym 65
2. ST5 [2012-2017] Wcelowane dostarczanie leków - synteza i funkcjonalizacja nanonośników 66
3. ST4 [2013-2017] Mechanizm regioselektywnego utleniania pochodnych cholesterolu przez nowy enzym molibdenowy, dehydrogenazę 25-OH sterolową ze *Sterolibacterium denitrificans* 67
4. ST4 [2013-2017] Mechanizm i kinetyka koalescencji pęcherzyków powietrza na spokojnych i zaburzanych z kontrolowaną częstotliwością powierzchniach ciecz/gaz 68
5. ST4 [2015-2017] Nowe biwarstwowe układy białkowe oparte na oddziaływaniach antygen-przeciwciało – charakterystyka fizykochemiczna in situ 69
6. ST4 [2016-2019] Biosynteza nowych estrów laktozy za pośrednictwem lipaz i ich właściwości jako związki przeciwrakowe 70
7. ST4 [2016-2019] Mechanizmy tworzenia i funkcjonalność multiwarstw nanocząstek zawierających biokompatybilne molekuly 71
8. ST4 [2016-2019] Bio oligo/polisacharydy pod wpływem sił zewnętrznych

Projekty badawcze NCN "Opus"

1. ST4 [2012-2016] Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant-polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanonośników 75
2. NZ1 [2012-2016] Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne i obliczeniowe 76
3. ST4 [2013-2016] Badania chemii powierzchni katalizatorów hybrydowych jako droga do wyjaśnienia ich właściwości katalitycznych w wysokociśnieniowej reakcji syntezy eteru dimetylowego z mieszaniny H₂/CO₂ 77
4. ST5 [2013-2016] Nanoklastery zeolitów jako podstawa nowych warstwowych materiałów porowatych do procesów katalitycznych w fazie ciekłej 78
5. ST5 [2013-2016] Projektowanie, synteza i charakterystyka fizykochemiczna katalizatorów rutenowych oraz ich zastosowanie w reakcji uwodornienia prochiralnych ketonów 79
6. ST4 [2013-2016] Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór 80
7. ST4 [2013-2016] Określenie mechanizmów adsorpcji wybranych białek anizotropowych w kontrolowanych warunkach transportu 81

8. ST5 [2013-2016] Struktura i właściwości warstw białkowych: od biomolekuły do funkcjonalnej warstwy (badania eksperymentalne i symulacje)	82
9. ST5 [2014-2017] Synteza kompozytów zawierających nanocząstki metali (Fe, Mn, Pd) i porowate, domieszkowane azotem materiały węglowe o różnej morfologii ziaren oraz charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych w reakcji redukcji tlenu	83
10. ST5 [2014-2017] Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania na osnowie organosmektytów interkalowanych odwróconymi micelami zawierającymi nanostruktury typu wodorotlenków i hydrotalkitów	84
11. NZ1 [2015-2018] Oksygenazy zależne od 2-oksoglutaranu katalizujące atypowe reakcje utleniania – badania nad strukturami oraz mechanizmami enzymatycznymi	85
12. ST5 [2016-2019] Teranostyczne nanoonośniki do obrazowania MRI	86
13. ST5 [2016-2019] Hierarchiczne katalizatory zeolitowe typu Y i omega nowej generacji: badania zaawansowanymi metodami IR, NMR oraz modelowanie strukturalne	87
14. ST5 [2016-2019] Monowarstwy nanocząstek o kontrolowanej heterogeniczności i strukturze jako efektywne substraty antyadhezyjne	88

Projekty badawcze NCN "Preludium"

1. ST4 [2014-2016] Sprzężenie elektronowe cząsteczki tlenku azotu (II) z centrami kobaltowymi w różnych otoczeniach koordynacyjnych: rola przepływu gęstości elektronowej w aktywacji liganda	91
2. ST4 [2014-2016] Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych	92
3. ST4 [2016-2017] Filmy polielektrolitowo-lipidowe z wbudowanymi hydrofobowymi nanocząstkami	93

Projekty badawcze NCN "Fuga"

1. ST3 [2015-2018] Wysokorozdzielcza analiza przestrzennych właściwości strukturyzowanych nanostruktur magnetycznych	97
2. ST4 [2015-2018] Wpływ promieniowania elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni na oddziaływanie białek z powierzchniami stałymi	98

Projekty badawcze MNiSW "Iuventus Plus"

1. [2014-2016] Teoretyczny opis wpływu zmian ruchliwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe na przebieg kolizji i kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego	101
2. [2016-2019] Określenie wpływu właściwości powierzchniowych nanocząstek srebra na ich aktywność cytotoksyczną wobec wybranych komórek ludzkiego układu immunologicznego oraz komórek tkanki łącznej właściwej	102

Projekty badań stosowanych NCBiR

1. [2013-2016] HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych (MN)	105
---	-----

Projekty NCBiR "Lider"

1. [2012-2016] Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej	109
---	-----

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty Akcji COST UE

1. EC COST CM1101 [2011-2016] Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials **113**
2. EC COST CM 1305 [2012-2018] ECOSTBio Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry **114**
3. EC COST CM1203 [2012-2016] PoCheMoN Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience **115**
4. EC COST MP1106 [2012-2016] SGI Smart and Green Interfaces - from Single Bubbles and Drops to Industrial, Environmental and Biomedical Applications **116**

Projekty Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej

1. [2013-2016] NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies against Neurodegenerative Diseases (core) **119**
2. [2013-2016] InlinePV In-line Processing of n+/p and p/p+ Junction System for Cheap Photovoltaic Module Production (core) **120**

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. [2016-2018] Organo-Clays as Intermediates for the Synthesis of Functional Hybrid Materials (projekt współpracy PAN - AN Słowacji) **123**

Projekty Programu Erasmus+

1. Program międzynarodowej wymiany naukowców Erasmus+ "Mobilność edukacyjna" **127**

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘC INSTYTUTU W ROKU 2016

W ROKU 2016:

uzyskano:	status (logo) Human Resources Excellence in Research nadawany przez Komisję Europejską międzynarodową akredytację ECTN Chemistry Doctorate Eurolabel prowadzonych przez Instytut Międzynarodowych Studiów Doktoranckich
realizowano:	18 statutowych zadań badawczych 35 projektów badawczych (grantów) MNiSW, NCBiR, NCN 4 projekty UE COST Action 2 projekty Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej 1 inny projekt międzynarodowy
opublikowano:	4 rozdziały w monografiach 112 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy Journal Citation Reports (lista A) (oraz 11 ogłoszonych elektronicznie) 11 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy MNiSW (lista B) 10 publikacji w innych w czasopismach, 203 streszczenia referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	2 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wygłoszono i zaprezentowano:	94 referaty i komunikaty (w tym 21 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 208 posterów
otrzymano: dokonano:	4 patenty krajowe 2 zgłoszeń patentowych (1 za granicą)
we współpracy z zagranicą:	opublikowano 45 wspólnych prac w czasopismach naukowych ogłoszono 29 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 125 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę
zorganizowano:	5 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki
tytuł profesora:	uzyskały 2 osoby
stopień doktora habilitowanego:	uzyskały 2 osoby
stopień doktora:	uzyskało 6 osób

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2016

- wyniki uzyskane w ramach projektów/ zadań badawczych

Model adsorpcji jonowych surfaktantów biodegradowalnych

Opracowany został model teoretyczny adsorpcji surfaktantów biodegradowalnych, w których część hydrofobowa i hydrofilowa połączone są wiązaniem estrowym. Model ten pozwolił na wyjaśnienie zależności między aktywnością powierzchniową i stabilnością tworzonych kompleksów z przeciwnie naładowanymi polielektrolitami, a strukturą cząsteczkową surfaktantu. Zastosowanie modelu umożliwi lepszy dobór surfaktantów do ich konkretnych zastosowań, w szczególności do syntezy nanokapsulek zdolnych do kontrolowanego uwalniania aktywnej zawartości w zależności od parametrów środowiska.

Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania

(projekt NCN OPUS 2013/09/B/ST5/00983 [2014-2017])

Zaprojektowano i otrzymano nową klasę aktywnych i termicznie stabilnych tlenkowych katalizatorów pełnego utleniania, mogących stanowić alternatywę dla kosztownych układów wykorzystujących metale szlachetne. Zaproponowane podejście zasada się na interkalacji organopochodnych krzemianów warstwowych nanocząstkami wodorotlenków metali przejściowych, które wytwarza się metodą odwróconych miceli. Wykazano, że tak otrzymane katalizatory przewyższają aktywnością tlenkowe katalizatory referencyjne.

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

Sposób wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra o dodatnim ładunku powierzchniowym

Opracowano nową metodę wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra o dodatnim ładunku, mających potencjalne zastosowanie jako środki biobójcze, w analityce chemicznej i w katalizie. Nanocząstki Ag wykazują dużą aktywność w stosunku do wielu patogenów, co jest wykorzystywane w biologii, medycynie, przemyśle farmaceutycznym i spożywczym. Dotychczasowym ograniczeniem ich efektywności był ujemny ładunek, który utrudniał efektywne osadzanie na powierzchniach stałych. Opracowana metoda przełamuje to ograniczenie.

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

Nowy sposób syntezy kalcyfediolu

Opracowano biotechnologiczną metodę selektywnej syntezy kalcyfediolu z witaminy D3 z zastosowaniem biokatalizatora. Proces ten jest jednoetapowy i szybki i nie generuje produktów ubocznych. Obecnie trwają testy wdrożeniowe u partnera przemysłowego.

Kalcyfediol jest aktywną pochodną witaminy D3 używaną w leczeniu krzywicy i zaburzeń gospodarki wapniowej. Jego dotychczasowa chemiczna synteza jest procedurą wieloetapową, długotrwałą i charakteryzującą się dość niską całkowitą wydajnością procesu.

Opracowanie oprogramowania HERIE

Opracowano oprogramowanie o nazwie HERIE do ilościowej oceny zagrożenia obiektów zabytkowych przez uszkodzenia fizyczne - pęknięcie, czy rozwarstwienia - powodowane przez zmiany wilgotności względnej i temperatury. Oceny tej dokonuje się przez obliczenie i analizę odkształceń, jakie powstają w konkretnych obiektach eksponowanych w rzeczywistych mikroklimatach. Opracowane narzędzie jest dostępne w sieci Internet dla każdej osoby zajmującej się ochroną zabytków.

– rezultaty współpracy międzynarodowej,

Zgłoszenie patentowe "Bridging Arrangement, Microelectronic component and Method for manufacturing A Bridging Arrangement"

(zgłoszenie patentowe UK GB 2531760; zgłoszenie patentowe USA, US 2016126202)

Zgłoszenie dotyczy kontrolowanej lokalizacji mikrocząstek pomiędzy dwoma powierzchniami elementów stosowanych w obwodach mikroelektronicznych. Kontrolę lokalizacji osiąga się przez odpowiednią modyfikację właściwości hydrofilowo-hydrofobowych powierzchni i ruch cząstek na skutek przemieszczanie się linii kontaktu trójfazowego. Zastosowanie proponowanej technologii pozwoli, na przykład, na poprawę właściwości termicznych połączeń obwodów mikroelektronicznych z elementami odprowadzającymi ciepło.

Publiczna baza danych wyników doświadczeń dyfrakcyjnych dla makromolekuł

Zespół prof. Władka Minora z University of Virginia, we współpracy z naukowcami z RCSB Protein Data Bank, The Scripps Research Institute oraz naszego Instytutu utworzył największą publiczną bazę danych (<https://www.proteindiffraction.org/>), która gromadzi i udostępnia nieprzetworzone wyniki pomiarów dyfrakcyjnych dla makromolekuł. Baza przyczyni się do dalszego rozwoju metod obliczeniowych i zwiększenia powtarzalności interpretacji danych dyfrakcyjnych.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2016:

W roku 2016 zorganizowano 5 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu, stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 25 listopada 2016

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

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

- J.Barbasz "Nauka w zabawie, zabawa w nauce"
- M.Krzan "Zrozumieć pianę - inspiracja w nauce, architekturze i sztuce"
- A.Micek-Ilnicka "Chemiczne puzzle, czyli świat molekularnych maszyn"
- D.Rutkowska-Żbik "Woda - co o niej wiemy"
- M.Szaleniec "Laboratorium szefa kuchni"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Mikro- i nano- świat widziany w mikroskopie skanningowym
- Temperatura, ciśnienie i my
- Owocowe baterie
- Reakcja katalityczna - rozkład nadtlenu wodoru
- Kamera termowizyjna
- W kolorowym świecie barwników
- Obrazy malowane światłem
- Czy białe jest białe?
- Konwertery energii
- Chemia od kuchni
- Łatwopalni
- Wcelowane dostarczanie leków – synteza i funkcjonalizacja nanoosników

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- 48. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków, 16-18 marca 2016
- 6th Meeting 'X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage', Krakow, May 19th-21st, 2016
- 16th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-16, Zakopane, June 19th-23rd, 2016
- QCM-D Workshop "Functional coatings using QCM-D system: theory and practice", Krakow, June 30th, 2016
- International Workshop "Materials and methods for cost-effective solar cell production" InLinePV Project Workshop, Krakow, November 16th, 2016

Organizacja imprez popularno-naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- Festiwal Nauki "Czas i przestrzeń", Rynek Główny, Kraków 19-21 maja 2016
- Dzień Otwarty I KiFP PAN, Kraków, 25 listopada 2016

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 roku 2016 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. „Aktywacja tlenu molekularnego ($3\Sigma_g$) na heteropolikwasach wolframowych i molibdenowych o strukturze anionu α -Keggina oraz α 1 i α 2 -Dawsona modyfikowanych kationem metalu przejściowego (TM= Cr^{3+} , Fe^{2+} , Mn^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} i Zn^{2+}) w pozycji poliatomu” (dr inż. Piotr Niemiec, współpraca z Wydziałem Chemii UJ)
2. "Strukturalny tlenkowy katalizator heterogeniczny dopalania LZO z wykorzystaniem nośnika typu piany ceramicznej" (dr Łukasz Mokrzycki; współpraca z Wydziałem Chemii UJ)
3. „Synteza octanu etylu z bioetanolu na drodze jednoetapowej reakcji utleniania w obecności katalizatorów opartych na palladowych solach heteropolikwasów” (Dr. Urszula Filek; współpraca z Wydziałem Chemii UJ)

Ponieważ w trakcie realizacji projektów z Instytutu odeszli Pan dr Piotr Niemiec i Pan dr Łukasz Mokrzycki, do realizacji zostały dopuszczone dwa kolejne projekty z listy rankingowej:

4. „Analiza kinetyki adsorpcji wyłącznie na podstawie struktury końcowych monowarstw adsorpcyjnych” (dr hab. inż. Jakub Barbasz; współpraca z Instytut Fizyki UJ)
5. „Wyznaczanie mechanizmów funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek plazmonicznych wybranymi aminokwasami i merkaptaminami w celu poszerzenia ich użyteczności w zastosowaniach biologicznych” (dr Magdalena Oćwieja; współpraca z Instytutem Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN)

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. Prof. John Z. Larese z Wydziału Chemii Uniwersytetu Tennessee w Knoxville (USA)
2. Prof. Wuge H. Briscoe ze School of Chemistry, University of Bristol (UK)
3. Prof. Sam de Visser z Manchester Institute of Biotechnology and School of Chemical Engineering and Analytical Science (UK)

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

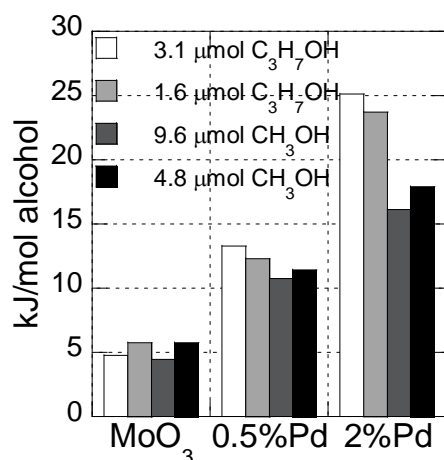
1. Nowe źródła energii; materiały i procesy. Procesy katalityczne z udziałem bio-surowców

(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)

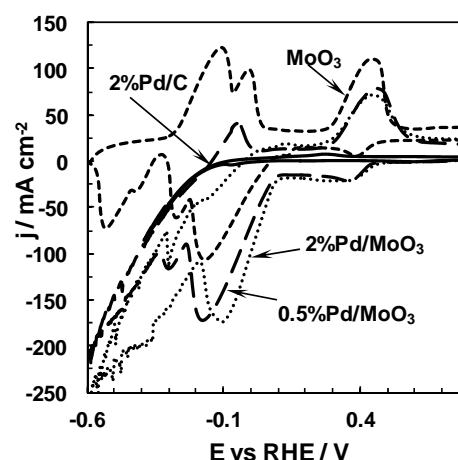
Celem badań były zagadnienia dotyczące określenia wpływu właściwości brązów wodorowych tworzonych w układach hybrydowych zawierających nanocząstki palladu zdyspergowane w matrycy tlenku molibdenu na ich reaktywność w procesie wydzielania wodoru z roztworów wodnych elektrolitów jak i alkoholi (metanol, etanol, izopropanol).

Realizowane prace obejmowały syntezę szeregu katalizatorów Pd/MoO₃ o zmiennej zawartości palladu (0.5-4 % wag) (impregnacja roztworem Pd(ac)₂, redukcja H₂ 250⁰C), które charakteryzowano metodami XRD, XPS, SEM (EDS), HRTEM. Wydzielanie wodoru z alkoholi (metanol, etanol, izo-propanol) badano w reaktorze przepływowym i metodą impulsową w mikrokalorymetrze przepływowym. Wydzielanie wodoru z roztworu wodnego H₂SO₄ badano metodą CV dla układów Pd/MoO₃ - węgiel przewodzący Vulcan XC72 (1/1 w/w).

Uzyskane wyniki. Badania pokazały obecność cząstek Pd 6-8 nm, i stopniowy wzrost ich agregacji wraz z zawartością Pd. Sorpcji alkoholi, metanolu, izopropanolu w 22⁰C na MoO₃ towarzyszył bardzo niski efekt cieplny (5 kJ/mol). Sorpcja dla Pd/MoO₃ była egzotermicznym procesem; ciepło wydzielone w obecności 0.5%Pd/MoO₃ było zbliżone dla obydwu alkoholi, 11 i 13 kJ/mol alkoholu (Rys. 1). Znacznie wyższa ilość ciepła 16 kJ/mol CH₃OH i 25 kJ/mol izopropanolu w obecności 2%Pd/MoO₃ jest porównywalna z ciepłem tworzenia Pd-H (ok. 20 kJ/mol H) co sugeruje rozkład tych alkoholi z utworzeniem wodoru.



Rysunek 1. Ciepło procesu Pd/MoO₃ - alkohol



Rysunek 2. Wydzielanie wodoru w obecności Pd/MoO₃

W procesie katalitycznego wydzielania wodoru z etanolu (200 - 550⁰C) tlenki MoO₃, MoO₂ były aktywne dopiero w temperaturze powyżej 350⁰C. Wydzielanie H₂ w obecności 2%Pd/MoO₃ zachodziło już w niskiej temp., 200⁰C, jego aktywność rosła ze wzrostem temperatury, przewyższając znacznie aktywność 2%Pd/MoO₂ i tlenków. W procesie wydzielania wodoru (elektroliza wody w ogniwach paliwowych) obecność MoO₃ spowodowała znaczący wzrost aktywności Pd/MoO₃ w stosunku do Pd/C. Aktywność (potencjał, gęstość prądu) zależała od zawartości Pd (0.5-4 %Pd). Metoda CV pokazała, że tworzenie brązów wodorowych zaburzało wydzielanie wodoru tylko dla 0.5%Pd/MoO₃. Udział tego procesu malał ze wzrostem zawartości Pd, optymalną aktywność wykazywał katalizator 2%Pd/MoO₃, co było wynikiem modyfikacji właściwości Pd w matrycy MoO₃ (obserwowane metodą XPS) przy stosunkowo niskim stopniu zagregowania nanocząstek Pd.

Uzyskane wyniki mogą stanowić podstawę dla projektowania elektrod dla ogniw paliwowych

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

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

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

W ramach badań prowadzonych w roku 2016:

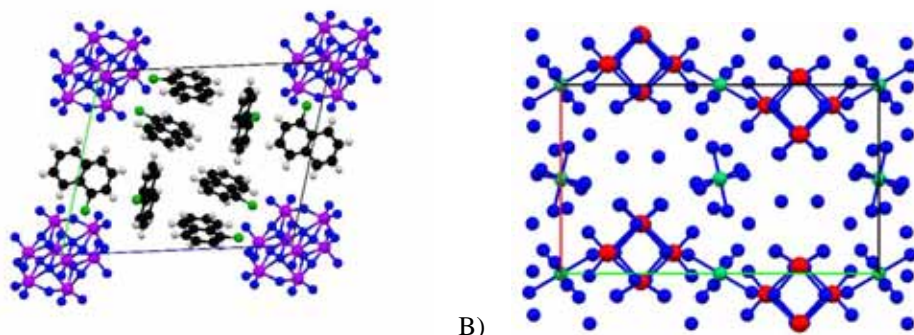
- Prowadzono prace nad otrzymaniem nowych związków z grupy peroksomolibdenianów z kationami typu sprotonowanych metylopirydyn.
- Badano nowe połączenia molibdenu powstające w reakcjach z aminopochodnymi naftalenu.
- Badano własności oraz aktywność katalityczną wybranych połączeń molibdenu (w tym z metalami przejściowymi), w reakcjach katalitycznego utlenienia cyklooktanu przy użyciu tlenu O_2 .

Opis najważniejszych osiągnięć:

- Otrzymano i zbadano nowe peroksomolibdeniany metylopirydyny. W wyniku badań uzyskano 2 nowe peroksozwiązki typu jedno- oraz siedmiordzeniowych klastrów peroksomolibdenianowych.
- Otrzymano i zbadano nowe oktamolibdeniany 1-aminofatleu oraz 2-aminonaftalenu. Związki te poddano badaniom strukturalnym oraz badaniom stabilności termicznej. W związkach tych występują izolowane klasterki oktamolibdenianowe otoczone przez duże kationy organiczne. W trakcie obróbki cieplnej oba związki wykazują stabilność termiczną do $150^\circ C$, następnie ulegają amorfizacji. W temperaturach ok. $400^\circ C$ powstaje tlenek molibdenu MoO_3 . Oba związki krystalizują w układzie trójskośnym. W odróżnieniu od związków otrzymywanych z roztworów zakwaszonych CH_3COOH lub HCl , reakcje prowadzone w roztworach wodnych prowadzą do uzyskania oktamolibdeniów, gdzie oprócz kationów organicznych występują obojętne molekuly amin organicznych.
- Badano aktywność katalityczną oraz stabilność trimolibdenianów metali przejściowych w funkcji temperatur. Poddano badaniom strukturalnym trimolibdenian niklu po reakcji katalitycznej.

Wykorzystanie uzyskanych wyników:

Część uzyskanych monofazowych preparatów użyto w testach katalitycznych, w reakcjach katalitycznego utleniania węglowodorów takich jak cyklooktan i limonen przy użyciu powietrza oraz gazowego O_2 . Molibdeniany metali przejściowych okazały się aktywne w reakcjach utleniania cyklooktanu. W reakcjach utleniania przy ich użyciu powstaje jako produkt m.in. kwas suberynowy. Metodą miareczkowania zwrotnego określono jego ilość na 15-20% produktów reakcji.



Rysunek 1. Przykłady nowych poliooksomolibdenianów uzyskanych w ramach badań. A) komórka elementarna β -oktamolibdenianu 1-aminonaftalenu, B) rzut struktury uwodnionego trimolibdenianu niklu. Kolory: czerwony, zielony, czarny, szary, niebieski i modry oznaczają molibden, azot, węgiel, wodór, tlen i nikiel.

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

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

Celem zadania badawczego była optymalizacja składu katalizatorów miedziowo-srebrowych osadzonych na nośnikach tlenkowych o zmiennej kwasowości i redukowalności oraz określenie wpływu dodatku promotorów (głównie Ru i Ce) do reakcji hydrogenolizy glicerolu do wybranych dioli: 1,3-propanodiolu i 1,2-propanodiolu.

Katalizatory miedziowo-srebrowe o zawartości 1, 2, 4 i 6 mmol Cu i Ag na 1g nośników SiO₂, Al₂O₃, TiO₂ i MgO zsyntetyzowano metodami współstrącania z NaOH i impregnacji, a następnie opracowano wstępny ranking ich aktywności w reakcji hydrogenolizy glicerolu. Dla najbardziej obiecujących katalizatorów określono wpływ promotorów (głównie Ru i Ce) na ich aktywność i selektywność syntetyzując metodami współstrącania i impregnacji układy zawierające 5% wag Ru i Ce osadzonych na 2mmolCu/MgO (2Cu/MgO), 4Cu/MgO, 2Cu/SiO₂, 4Cu/SiO₂. Wszystkie otrzymane próbki wstępnie scharakteryzowano dostępnymi metodami fizykochemicznymi: metodę XRD zastosowano do określenia składu fazowego, BET do wyznaczenia powierzchni właściwych katalizatorów, H₂-TPR do określenia ich redukowalności. Testy katalityczne wykonano mieszając 2g katalizatora w 30 cm³ 50%vol. roztworu glicerolu w wodzie w 100 cm³ reaktorze typu „batch” w temp. 200°C, t = 24h, p_{H₂} = 40atm, szybkość obrotów mieszadła 400 r.p.m., po wstępnym przygotowaniu: przemyciu azotem aby usunąć zanieczyszczenie tlenem, a następnie pre-redukcji w atmosferze wodoru (200°C, t=2h, p_{H₂}=5atm, 100 r.p.m.). Konwersję glicerolu i selektywności do dioli wyznaczano używając wysokosprawnej chromatografii gazowej z detektorem FID.

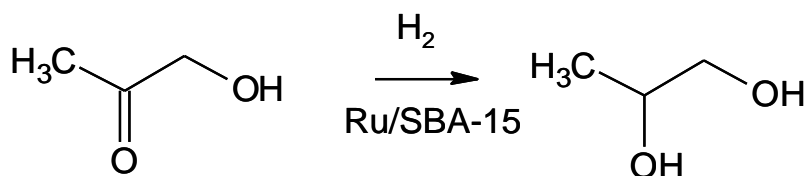
Stwierdzono, że obecność srebra w katalizatorach bimetalicznych nie poprawia aktywności katalitycznej w badanej reakcji. Najaktywniejszymi okazały się próbki zawierające 2 i 4 mmol Cu na 1 g nośnika. Spośród przebadanych próbek na różnych nośnikach najwyższą aktywnością charakteryzowały się układy z MgO. Jednak katalizatory osadzone na tym tlenku były stosunkowo trudne do odzysku po reakcji, zatem do dalszych badań wybrano również układy z miedzią osadzoną na SiO₂: 2Cu/MgO, 4Cu/MgO, 2Cu/SiO₂, 4Cu/SiO₂. Dodatek promotorów powoduje zwiększenie aktywności katalitycznej badanych próbek. Konwersje glicerolu na katalizatorach z MgO jako nośnikiem wahały się w granicach 74–100%, zaś dla układów z SiO₂ 5-28%, przy wydajności do 1,2-propanodiolu odpowiednio 59-77% i 4-24%. Wydajność do 1,3-propanodiolu wynosiła 5-11% dla katalizatorów na osnowie MgO, natomiast w układach na SiO₂ nie wykryto jego powstawania. Najbardziej obiecujące wyniki uzyskano dla próbki 2Cu/MgO domieszkowanej rutenem metodą impregnacji – konwersja glicerolu wyniosła 100% przy wydajności do 1,2-propanodiolu 77%.

Proponowane badania miały na celu otrzymanie bio-komponentów do tworzyw sztucznych - dioli. Najbardziej pożądanymi produktami przeróbki gliceryny do dioli są 1,3-propanodiol i 1,2-propanodiol. Związki te stanowią monomery do produkcji szeregu tworzyw sztucznych, m.in. poliestrów, polieterów i poliuretanów.

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

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

Celem pracy było zbadanie możliwości recyklingu heterogenicznych katalizatorów rutenowych osadzonych na mezoporowatej krzemionce typu SBA-15 w reakcji uwodornienia acetonu 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, uwodornienie acetonu odgrywa ważną rolę w procesie hydrogenolizy glicerolu.



Rysunek 1. Schemat reakcji uwodornienia acetonu

Testom poddano katalizator o zawartości 2% wag. Ru na SBA-15 (2 wt.% Ru/SBA-15), oraz katalizator referencyjny, zawierający 2% wag. Ru osadzonego na wysokopowierzchniowej krzemionce (2 wt.% Ru/SiO₂). Badaną reakcję prowadzono w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury (1 bar H₂, temperatura pokojowa); jako rozpuszczalnika użyto wody. Jedynym produktem reakcji był 1,2-propanodiol. W pierwszym cyklu reakcyjnym katalizator 2 wt.% Ru/SBA-15 osiągał 95% konwersji po 4 godz. testu. Odzyskany i użyty ponownie tracił częściowo aktywność, dając 60% konwersji. Kiedy jednak materiał odzyskany po pierwszym cyklu reakcyjnym przed kolejnym zastosowaniem ponownie zredukowano roztworem NaBH₄, obserwowano powrót do wyjściowej, wysokiej aktywności. Katalizator referencyjny dawał konwersję acetonu na poziomie 36%. Po powtórным użyciu wartość ta spadała do 11%, a ponowne potraktowanie roztworem NaBH₄ nie dało pozytywnego rezultatu.

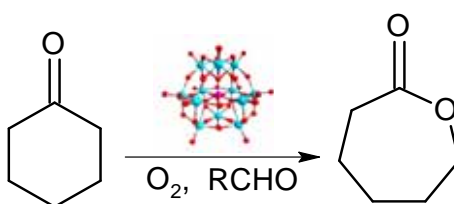
Badania XPS wykazały, że dezaktywacja katalizatora wynikała z częściowego utlenienia jego powierzchni i chemisorpcji produktów reakcji. W przypadku katalizatora 2 wt.% Ru/SBA-15 oba efekty zanikały po potraktowaniu roztworem NaBH₄. Zabieg taki nie przywracał aktywności układowi 2 wt.% Ru/SiO₂. Na podstawie wyników TPR można to powiązać ze znacznie słabszą redukowalnością aktywnej fazy Ru w próbce referencyjnej w porównaniu z katalizatorem 2 wt.% Ru/SBA-15.

Otrzymane wyniki stanowią podstawę dla opracowania formuły katalizatora heterogenicznego wykazującego wysoką aktywność katalityczną w reakcjach uwodornienia w fazie ciekłej w łagodnych warunkach ciśnienia i temperatury, zachowującego właściwości katalityczne przy wielokrotnym użyciu.

5. Heteropolizwiązki jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu tlenem molekularnym

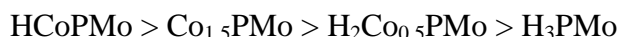
(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Katarzyna Pamin, dr Jan Połtowicz, dr Joanna Kryściak-Czerwenka, dr Robert Karcz, mgr Bogna D. Napruszewska)

Celem badań była synteza, oraz określenie właściwości fizykochemicznych i katalitycznych serii soli kobaltowych kwasów $H_3PMo_{12}O_{40}$ (H_3PMo) i $H_3PW_{12}O_{40}$ (H_3PW). Otrzymano sole o różnym stopniu podstawienia kobaltem, oznaczone $H_{3-2x}Co_xPMo$ i $H_{3-2x}Co_xPW$, gdzie $x=0.5, 1, 1.5$. Badane układy zostały zastosowane jako katalizatory w reakcji Baeyera-Villigera utleniania cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu za pomocą tlenu cząsteczkowego w obecności aldehydu (Rys. 1). ϵ -kaprolakton jest substratem do otrzymywania biodegradowalnego polimeru mającego zastosowanie w medycynie.



Rysunek 1. Reakcja utleniania cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu.

Właściwości fizyko-chemiczne otrzymanych katalizatorów badano metodami FTIR, UV-Vis, oraz analizy termicznej DSC i cykliczną woltametrią. Wszystkie otrzymane heteropolizwiązki były aktywnymi katalizatorami badanej reakcji utleniania. Heteropolikwas H_3PMo był bardziej aktywny niż H_3PW . Wprowadzenie kobaltu w pozycje kationowe poprawiało właściwości katalityczne, przy czym wszystkie sole kobaltowe kwasu fosforowolframowego były bardziej aktywne niż odpowiednie sole kobaltowe kwasu fosfomolibdenowego. W obu seriach najbardziej aktywny był katalizator zawierający jeden atom kobaltu na anion Keggina. Dla układu $H_{3-2x}Co_xPMo$ otrzymano następujący szereg aktywności:



Aktywność katalityczna heteropolizwiązków $H_{3-2x}Co_xPW$, zmieniała się w następujący sposób:



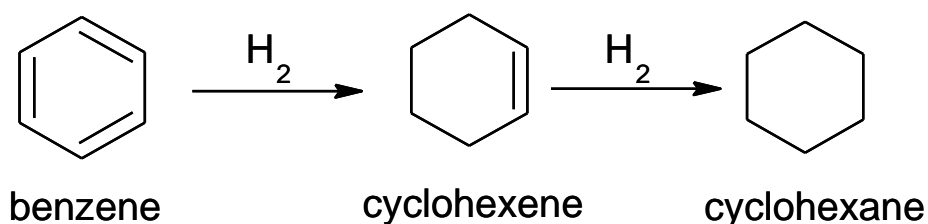
Katalizator $HCoPW$ był najbardziej aktywny spośród wszystkich zsyntezowanych heteropolizwiązków. Otrzymane rezultaty wskazują, że parametrami wpływającymi na aktywność katalityczną badanych układów są zarówno właściwości redoksowe jak i kwasowe.

Wyniki te stanowią podstawę dla podjęcia szczegółowych badań nad rolą funkcji kwasowej i funkcji redoksowej heteropolizwiązków w utlenianiu cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu za pomocą tlenu cząsteczkowego.

6. Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Jan Połtowicz, dr Katarzyna Pamin, dr Dorota Duraczyńska, dr Alicja Michalik-Zym, dr Małgorzata Zimowska, mgr Bogna D. Napruszewska)

Celem badań było określenie aktywności i selektywności serii nośnikowanych katalizatorów rutenowych w reakcji uwodornienia benzenu w fazie ciekłej. Reakcja uwodornienia benzenu jest reakcją następczą przebiegającą do cykloheksanu poprzez cykloheksen (Rys.1). Na większości typowych katalizatorów metalicznych zasadniczym produktem reakcji jest cykloheksan. Wykazano jednak, że zastosowanie katalizatora typu czerni rutenowej pozwala zwiększyć selektywność do bardziej pożądanego produktu pośredniego, cykloheksenu. W obecnej pracy badano wpływ różnych nośników i różnych sposobów nanoszenia na właściwości katalityczne aktywnej fazy rutenowej.



Rysunek 1. Schemat reakcji uwodornienia benzenu

Reakcję uwodornienia prowadzono w reaktorze tytanowym o objętości 1 litra w układzie czterofazowym, pod ciśnieniem 50 atm wodoru i w temperaturze 150°C. Przygotowano serię katalizatorów zawierających ok. 2% wag. rutenu, w tym katalizator Ru/SBA-15 otrzymany przez impregnację mezoporowatej krzemionki SBA-15, Ru/SBA-15(AEPTS) otrzymany w drodze szczepienia rutenu na SBA-15 funkcjonalizowanym N-[3-(trimetoksyl)propyl]etylenodiaminą (AEPTS), oraz Ru/PDDA-mt otrzymany przez wymianę kationową z organiczną pochodną montmorillonitu otrzymaną przez interkalację poli(chlorku dimetylodialliloamonowego) (PDDA). We wszystkich przypadkach źródłem rutenu był wodny roztwór RuCl₃. W reakcji uwodornienia benzenu wydajność do cykloheksenu zależała w istotny sposób od rodzaju użytego katalizatora i zmieniała się w kolejności Ru/SBA-15 > Ru/PDDA-mt > Ru/SBA-15(AEPTS).

Badania SEM i TEM wykazały, że czynnikiem decydującym o właściwościach katalitycznych tych układów może być stopień dyspersji rutenu. W katalizatorze Ru/SBA-15 są to nanocząstki wielkości 5-8 nm, w Ru/PDDA-mt nie większe niż 2-3 nm, a w Ru/SBA-15(AEPTS) ruten jest jeszcze bardziej rozproszony i nie tworzy cząstek wykrywalnych metoda TEM.

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

7. Aktywność fotokatalityczna kompozytów typu mineral warstwowy/tlenek metalu przejściowego

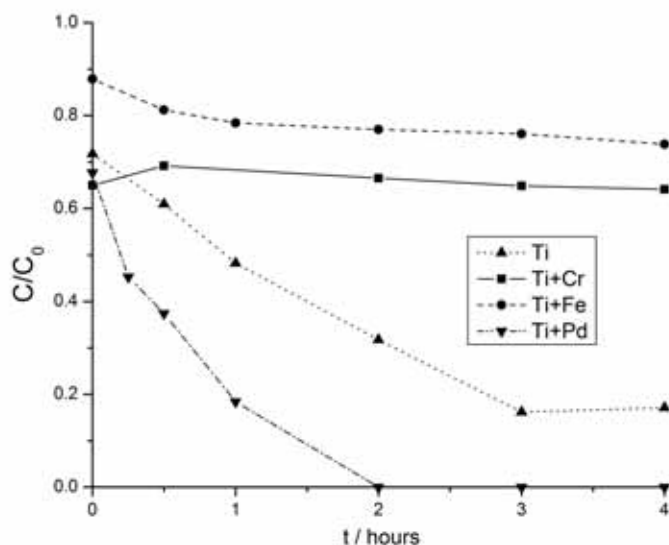
(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, prof. Piotr Warszyński, prof. Paweł Nowak, dr Grzegorz Mordarski, dr Alicja Michalik-Zym, dr Elżbieta Bielańska)

Celem badań była synteza, charakterystyka fizykochemiczna i porównanie właściwości fotokatalitycznych układów kompozytowych typu TiO_2 /montmorillonit domieszkowanych jonami metali przejściowych.

Kompozyty TiO_2 -montmorillonit otrzymano z formy sodowej montmorillonitu stosując metodę tzw. podpierania, w której kationy Na^+ z obszaru międzypakietowego montmorillonitu są wymieniane na duże oligokationy tytanowe. Po kalcynacji w 450°C oligokationy Ti przekształcają się w nanoklastery TiO_2 (podpórki) trwale wiążące sąsiednie pakiety minerału. Otrzymany w ten sposób kompozyt, oznaczony Ti-PILC, domieszkowano wprowadzając w jego strukturę 1% wag. chromu (Cr-Ti-PILC), żelaza (Fe-Ti-PILC) lub palladu (Pd-Ti-PILC). Domieszkowanie wykonano metodą impregnacji roztworami odpowiednich soli, po czym kompozyty ponownie kalcynowano. Otrzymane materiały zostały scharakteryzowane metodami XRD, XRF, SEM, spektroskopii Ramana, oraz adsorpcją/desorpcją N_2 , a następnie przetestowane w reakcji fotokatalitycznej degradacji oranżu metylowego, modelowej substancji organicznej, zarówno w zakresie promieniowania UV jak i sztucznego światła słonecznego.

Kompozyt Ti-PILC charakteryzował się stosunkowo dobrze uporządkowaną strukturą warstwową, o odległości międzypakietowej rzędu 2.5 nm i powierzchnią właściwą $379 \text{ m}^2/\text{g}$. Dotowanie praktycznie nie zmieniało parametrów teksturalnych matrycy Ti-PILC. Nanocząstki TiO_2 wykazywały strukturę anatazu. Badania fotokatalitycznego rozkładu oranżu metylowego na katalizatorze Ti-PILC wykazały, że w ciągu 4 godz. naświetlania światłem UV stężenie barwnika spadło do około 20% wyjściowej wartości (Rysunek 1). Eksperymenty z preparatami Cr-Ti-PILC i Fe-Ti-PILC wykazały, że dotowanie chromem i żelazem skutkuje prawie całkowitym zanikiem właściwości fotokatalitycznych. Natomiast, w przypadku kompozytu Pd-Ti-PILC zaobserwowano gwałtowny rozkład oranżu metylowego jeszcze przed rozpoczęciem naświetlania, a włączenie źródła UV powodowało prawie całkowitą dekoloryzację roztworu już po dwóch godzinach.

Uzyskane wyniki stanowią punkt wyjścia do dalszych badań nad właściwościami fotokatalitycznymi montmorillonitów podpieranymi tlenkami metali przejściowych.



Rysunek 1. Fotokatalityczny rozkład oranżu metylowego na próbkach Ti-PILC oraz Me-Ti-PILC (Me = Cr, Fe, Pd). Początkowe stężenie oranżu metylowego $1 \times 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$, stężenie zawiesiny fotokatalizatora 1000 mg dm^{-3} . Promieniowanie UV o natężeniu 48.8 mW cm^{-2} (lampa ksenonowa).

8. Nowe kompozytowe materiały katodowe do wysokotemperaturowych ogniw paliwowych

(dr hab. Michał Mosiałek, dr Grzegorz Mordarski, prof. Paweł Nowak, mgr Aneta Krawczyk, dr Elżbieta Bielańska)

Różnice w wartości współczynnika rozszerzalności cieplnej (WRC) pomiędzy elementami wysokotemperaturowego ogniwa paliwowego (WOP) powodują powstawanie naprężeń mechanicznych wewnątrz ogniwa w trakcie zmian temperatury i przyczyniają się do skrócenia czasu jego pracy. Ogranicza to bardzo możliwości wyboru materiałów do konstrukcji ogniw, co jest szczególnie istotne w przypadku katody ogniwa, gdyż to właśnie wysoki nadpotencjał procesu katodowego powoduje największe straty energii w ogniwie. Problem ten występuje ostatnio z coraz większą ostrością, ze względu na tendencję do obniżania temperatury pracy WOP. Tymczasem materiały katodowe, które wykazują się wysoką aktywnością katalityczną i zadowalającą przewodnością elektryczną w stosunkowo niskich temperaturach, charakteryzują się równocześnie wysokim WRC, znacznie wyższym niż możliwe do zastosowania w tych temperaturach materiały elektrolitowe. Celem badań było otrzymanie materiałów, charakteryzujących się wysoką aktywnością katalityczną w reakcji redukcji tlenu (RRT) o WRC zbliżonym do stosowanych obecnie materiałów elektrolitowych.

Badania prowadzono w dwóch kierunkach. Przez jednoczesne użycie materiału katodowego o bardzo wysokiej aktywności katalitycznej w RRT, ale wysokim WRC wraz z materiałem o niższej aktywności ale niskim WRC otrzymywano katody kompozytowe oraz katody składające się z warstw pojedynczych i/lub kompozytowych materiałów w różnych konfiguracjach przestrzennych. Zastosowano żelaziano-kobaltan lantanu strontu $\text{La}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{Co}_{0,8}\text{Fe}_{0,2}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCF), materiał o umiarkowanej aktywności katalitycznej ale równocześnie bardzo wysokim przewodnictwie elektrycznym oraz niskim WRC i żelaziano-kobaltan baru strontu $\text{Ba}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{Co}_{0,8}\text{Fe}_{0,2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSCF) o bardzo wysokiej aktywności ale wysokim WRC. Innym zastosowanym rozwiązaniem było nanoszenie materiału aktywnego w stanie wysokiego rozproszenia na powierzchnię porowatej matrycy z materiału o niskim WRC i umiarkowanej aktywności katalitycznej w RRT. W tym przypadku w charakterze matrycy zastosowano żelazian lantanu strontu $\text{La}_{0,6}\text{Sr}_{0,4}\text{FeO}_{3-\delta}$ (LSF). Porowatą matrycę z tego związku nasączano roztworem prekursora materiału o wysokiej aktywności: tlenku kobaltu (azotan kobaltu), lub kobaltanu samaru strontu $\text{Sm}_{0,5}\text{Sr}_{0,5}\text{CoO}_{3-\delta}$ (SSC) (mieszanina azotanu samaru i azotanu strontu) i wyprażano. W obu przypadkach jako elektrolitu użyto tlenek ceru domieszkowany samarem $\text{Ce}_{0,8}\text{Sm}_{0,2}\text{O}_{1,9}$. Otrzymane półogniwa były badane metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej w zakresie temperatur 500-700 °C i ciśnień parcjalnych tlenu 0,001-1.

Spośród katod z pierwszej serii najniższe opory polaryzacyjne wykazała katoda wykonana z mieszaniny LSCF i BSCF wykazując jednocześnie znacznie wyższą trwałość niż katoda z BSCF. Otrzymany materiał charakteryzował się również najniższą energią aktywacji oporu polaryzacyjnego (patrz tabela). Materiały otrzymane drugim sposobem nie wykazały korzystnych właściwości.

Oporność polaryzacyjna $\Omega \text{ cm}^2$	Temperatura	LSCF	BSCF	LSCF+BSCF
	700 °C	2,1	14	0,46
	600 °C	18	76	2,8
Energia aktywacji w zakresie 600-700 °C / kJ mol^{-1}		72	46	33,5

Opisany kompozytowy materiał katodowy LSCF-BSCF może zostać zastosowany w wysokotemperaturowych ogniwach paliwowych.

9. Enzymatyczne procesy utleniania i redukcji

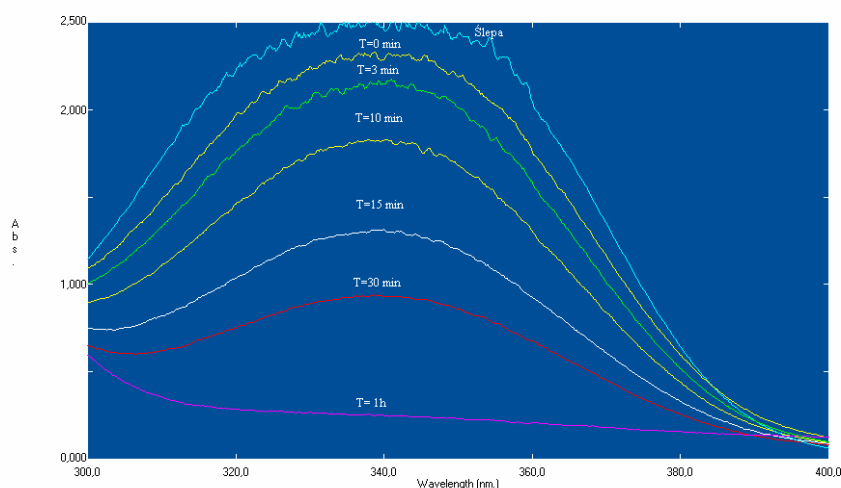
(dr Maciej Guzik, dr hab. Maciej Szaleniec, prof. IkiFP PAN, dr hab. Tomasz Borowski, prof. IkiFP PAN)

Tematyka badawcza obejmuje zagadnienia związane z reakcjami utleniania i redukcji związków pochodzenia bakteryjnego w celu zmiany ich konfiguracji optycznej. Motywacją dla przeprowadzenia tych badań jest fakt, iż zmiana konfiguracji optycznej może spowodować zmianę właściwości biologicznych tych związków. Związki wyjściowe wywodzą się z rodziny poliestrów pochodzenia bakteryjnego po ich depolimeryzacji do monomerów – hydroksykwasów o bezwzględnej konfiguracji optycznej R grupy hydroksylowej. Celem projektu było wykorzystanie enzymów do zmiany tej konfiguracji – użycie dehydrogenaz NADH zależnych do przejścia od R-alkoholu poprzez keto-związek a następnie otrzymanie S-alkoholu.

W procesie fermentacji bakteryjnej z użyciem szczepu *Pseudomonas putida* otrzymano polimer, który poddano chemicznej depolimeryzacji do mieszaniny monomerów zawierającej odpowiednie proporcje hydroksykwasów alifatycznych. Podjęto próby otrzymania keto-związków na drodze enzymatycznej konwersji R-alkoholu przy pomocy dehydrogenazy fenyletanolowej NADH zależnej (S-PEDH). Mimo prób optymalizacji reakcji enzymatycznej nie uzyskano keto-związków. Etap ten zastąpiono reakcją utleniania na drodze chemicznej (utlenianie z użyciem odczynnika Dess-Martina). Posiadając keto-związek zweryfikowano reakcję odwrotną z użyciem S-PEDH, tj. otrzymywanie R-alkoholu, która dała wynik pozytywny. Obserwacje potwierdzono przy użyciu chromatografii gazowej z rozdziałem na kolumnie chiralnej (Rysunek 1). W celu otrzymania S-alkoholu użyto analogicznego enzymu (dehydrogenazę fenyletanolową NADH zależną R-PEDH). Reakcja przy użyciu tego enzymu i keto-związku jako substratu dała pozytywny wynik, gdzie otrzymano S-alkohol.

Opracowano chemo-enzymatyczną metodę zmiany konfiguracji optycznej wybranych hydroksykwasów.

Uzyskane wyniki będą punktem wyjścia w badaniach nad zwiększeniem skali prowadzonej produkcji w warunkach reaktorowych.



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

10. Fizykochemia heteropolizwiązków i ich katalityczne właściwości w konwersji alkoholi. Obliczenia DFT vs. eksperyment

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

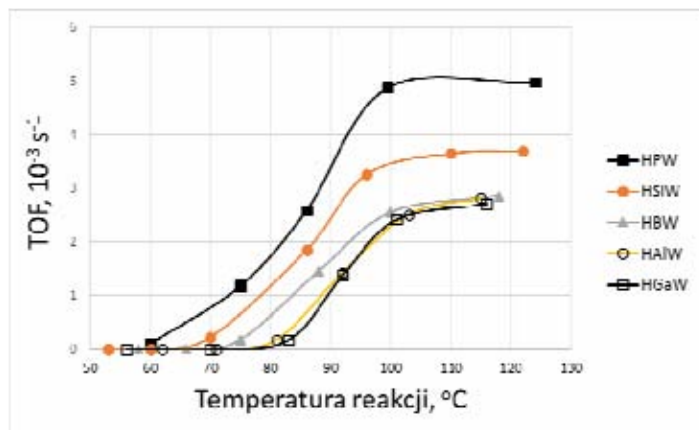
Celem badań eksperymentalnych i teoretycznych był opis struktury elektronowej oraz właściwości fizykochemicznych i katalitycznych heteropolizwiązków, o strukturze anionu Keggina, z wybranymi (P, Si, B, Al, Ga) jonami centralnymi, pierwiastkami z grup 13-15.

W oparciu o dane literaturowe zsyntetyzowano trzy heteropolikwasy o strukturze anionu Keggina $[XW_{12}O_{40}]^{5-}$ z różnymi atomami centralnymi z grupy 13 (borem, glinem, galem). Ich właściwości fizykochemiczne i katalityczne porównano ze znanymi komercyjnymi heteropolikwasami $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) i $H_4SiW_{12}O_{40}$ (HSiW), zawierającymi, jako atomy addenda, atomy wolframu. Pomiar XRD otrzymanych preparatów wykazały krystaliczność typową dla anionów Keggina. Trwałość termiczna heteropolizwiązków, ustalona na podstawie pomiarów derywatograficznych wyniosła odpowiednio: 434 °C $H_5BW_{12}O_{40}$ (HBW), 474 °C $H_5AlW_{12}O_{40}$ (HAlW) i 440 °C $H_5GaW_{12}O_{40}$ (HGaW). W widmach IR heteropolizwiązków widać rozciągające drgania strukturalne charakterystyczne dla anionu Keggina występujące przy częstotliwościach odpowiednio dla $[BW_{12}O_{40}]^{5-}$: 1002, 959, 917, 807 cm^{-1} , dla $[AlW_{12}O_{40}]^{5-}$: 967, 907, 798, 758 cm^{-1} i dla $[GaW_{12}O_{40}]^{5-}$: 967, 900, 762, 734 cm^{-1} .

Dla wszystkich badanych związków, równoległe z badaniami eksperymentalnymi wykonano obliczenia kwantowo-chemiczne. Obliczenia przeprowadzono metodą DFT, stosując zarówno model klasterowy (anion Keggina z/bez H^+) jak i obliczenia periodyczne (optymalizacja parametrów komórki elementarnej).

Dla każdego z układów wyznaczono parametry struktury elektronowej (analiza populacyjna centrów aktywnych, skład i charakter orbitali granicznych, widma DOS, IR). Wyznaczone teoretycznie widma IR porównano z widmami eksperymentalnymi. Za miarę właściwości redoksowych przyjęto energetykę orbitali granicznych, co pozwoliło na uszeregowanie badanych układów w szeregu: P (-4.33) < Si (-3.95) < Ga (-3.61) < Al (-3.59) < B (-3.53). Właściwości kwasowe modelowano poprzez wyznaczenie energii tworzenia kationów H^+ , z grup $H_5O_2^+$ i z grup OH^- utworzonych z udziałem różnych centrów tlenowych.

Preparaty zostały przetestowane w reakcjach konwersji alkoholu etylowego i izopropylowego przeprowadzonych w fazie gazowej, odpowiednio w zakresie temperatur 70-290 °C i 50-130 °C. Naważki preparatów wynosiły 0,1 g, prędkość przepływu reagenta przez reaktor - 35 ml/min, WHSV - 1,9 h^{-1} . Produktami odwadniania był etylen i dietylowy eter oraz propylen i eter di-izopropylowy.



Na podstawie zależności TOF od temperatury reakcji konwersji etanolu i izopropanolu na heteropolikwasach z różnymi atomami centralnymi (Rysunek) ustalono szereg aktywności katalitycznej:



Szereg ten jest zgodny z przewidywaniami, dokonanymi na podstawie obliczeń teoretycznych.

Zachowanie katalityczne heteropolizwiązków $H_5BW_{12}O_{40}$, $H_5AlW_{12}O_{40}$ i $H_5GaW_{12}O_{40}$ poszerzy wiedzę podstawową z zakresu chemii heteropolikwasów

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

(prof. Ewa Broclawik, prof. Bogdan Sulikowski)

Modelowanie kwantowo-chemiczne dla oceny kwasowości modyfikowanych zeolitów typu USY (badanych także metodami IR) oraz kontynuacja badań 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 fojazytu (w zakresie zawartości ilości glinu sieciowego i pozasieciowego) a ich kwasowością, aktywnością i selektywnością w procesie transformacji α -pinenu w fazie ciekłej.

Określono metodami periodycznymi DFT oraz dynamiki molekularnej zależność i charakter donorowy centrum Co(II) w Chabazycie, wiążącego NO i modyfikowanego ligandami donorowymi (NH_3); obliczono także przesunięcia częstości drgań kwasowych grup OH oddziałujących z cząsteczką sondą (CO) w modyfikowanych zeolitach typu USY. 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}Si i ^{27}Al . Wykonano eksperymenty mające na celu wygenerowanie w zeolitach dodatkowego systemu mezoporów. Badania fizykochemiczne skorelowano z aktywnością katalityczną w procesie izomeryzacji α -pinenu. Przeprowadzono dealuminiowanie naturalnego mezolitu (zeolitu o strukturze NAT) i skorelowano parametry geometryczne sieci glinokrzemianowej z widmami ^{29}Si i ^{27}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, fojazytu i mordenitu. Obliczono zmianę częstości drgań grup OH...CO w zeolicie Y w zgodności z widmami IR. Ilościowa dekonwolucja widm NMR pozwoliła na ściśle 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).

Zaproponowana reinterpretacja widm IR dla NO związanego z modyfikowanymi centrami Co(II) w zeolitach powinna poszerzyć możliwości interpretacji widm IR dla cząsteczek-sond. Wykazano, po raz pierwszy w literaturze światowej, obecność glinu w trzech nierównocennych magnetycznie and krystalograficznie pozycjach sieciowych w naturalnym mezolicie, stosując metodę ^{27}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

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

Celem badań jest wytworzenie epitaksjalnych warstw heterostruktur i nanostruktur o określonych właściwościach fizykochemicznych. Badania koncentrują się w dwóch obszarach dotyczących właściwości magnetycznych oraz strukturalnych i elektronowych. W szczególności badane są możliwości kształtowania anizotropii magnetycznej przez odpowiedni dobór składu heterostruktur warunkujący uzyskanie korzystnych relacji pomiędzy anizotropią powierzchniową/interfejsową oraz anizotropią objętościową. Badane są układy, w których występuje różnego typu spontaniczna reorientacja namagnesowania, zarówno w płaszczyźnie, jak i między płaszczyzną a kierunkiem normalnym. Zjawiska te występują zarówno w metalicznych układach dwu- i wielowarstwowych jak i w heterostrukturach typu metal-tlenek. Te ostatnie układy badane są również pod kątem właściwości strukturalnych i elektronowych warunkujących możliwości zastosowań jako modelowe katalizatory będące odpowiednikami analizowanych układów polikrystalicznych.

Badano anizotropię magnetyczną epitaksjalnych dwuwarstw Co/Fe(110) na podłożu W(110). W układzie tym stabilizowana jest faza kobaltu o strukturze regularnej przestrzennie centrowanej. W układzie tym obserwowano reorientację spinową (SRT – spin reorientation transition) w płaszczyźnie warstwy. Innego typu przejście SRT badano w ultracienkich warstwach Fe w układzie MgO/Cr/Fe/MgO, w których odpowiednia preparatyka powoduje przejście namagnesowania z płaszczyzny do kierunku prostopadłego. W układach Fe/MgO/Fe oraz MgO/Fe/FeO badano właściwości magnetyczne wynikające z oddziaływań dipolowych i pośrednich oddziaływań wymiennych. W układach Fe/TiO₂(110) oraz O/Fe/W(110) badano strukturę atomową i elektronową warstwy granicznej metal-tlenek oraz metal-tlen.

W heterostrukturach Co/Fe(110) na podłożu W(110) powierzchniowa anizotropia magnetyczna wykazywała silnie niemonotoniczną zależność od grubości warstwy kobaltu d_{Co} w zakresie do ok. 2 nm. Badania magnetoptyczne wykazały maksymalną wartość powierzchniowej stałej anizotropii równą 2.44 mJ/m² dla $d_{Co}=0.5$ nm. Tak silna anizotropia o charakterze powierzchniowym powoduje, że ułamek monowarstwy Co wywołuje zmianę orientacji namagnesowania w warstwie Fe o grubości rzędu 20 nm. Określono ponadto, że monoatomowe warstwy BCC-Co(110) wykazują anizotropię z osią łatwą w płaszczyźnie w kierunku [1-10].

W epitaksjalnym układzie MgO(001)/Cr/Fe/MgO, w którym ostatnio wykryto prostopadłą anizotropię magnetyczną w temperaturze pokojowej dla warstw Fe o grubości poniżej 1 nm zbadano za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji wpływ struktury warstw granicznych na występowanie przejścia SRT i stwierdzono, że jest ono spowodowane segregacją atomów chromu do warstwy granicznej Fe/MgO.

Dla trójwarstw Fe/MgO/Fe stanowiących archetyp złącza z efektem tunelowego magnetooporu stwierdzono istnienie antyferromagnetycznego oddziaływania międzywarstwowego dla przekładki MgO o grubości pojedynczych warstw atomowych. Pokazano, że nanostrukturyzacja warstw w istotny sposób modyfikuje oddziaływanie wymienne i wyznaczono zależność sprzężenia dipolowego od rozmiarów złącza. Ze względu na istotną rolę struktury chemicznej w warstwach granicznych Fe/MgO zostały one poddane szczegółowym badaniom pod kątem tworzenia się monowarstwy FeO.

Badano nukleację i początkowe fazy wzrostu Fe na powierzchni rutylu $\text{TiO}_2(110)$. Korelacja wyników skaningowej mikroskopii tunelowej oraz spektroskopii fotoelektronów pozwoliła określić morfologię klasterów Fe i ich strukturę chemiczną oraz wpływ na nie wygrzewania. Stwierdzono, że łagodne warunki wygrzewania ($T < 500 \text{ K}$) powodują nieznaczną aglomerację klasterów Fe, natomiast dla wyższych temperatur następuje inkorporacja żelaza w podłoże TiO_2 .

Przy pomocy mikroskopii na niskoenergetycznych elektronach zweryfikowano typy struktur tlenu chemisorbowanego na powierzchni $\text{Fe}(110)$ i opisano strukturę ich domen zwierciadlanych.

Wyniki badań są na bieżąco wykorzystywane w realizacji prac doktorskich, a także posłużyły jako baza zakwalifikowanego do finansowania wniosku o projekt NCN. Badania w powyższej tematyce będą kontynuowane i poszerzane w związku z uruchomieniem linii PEEM-XAS w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego SOLARIS.

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

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

Celem badań była analiza wpływu różnych parametrów mikroskopowych i fizykochemicznych na możliwość kontroli zjawisk zachodzących w układach o znaczeniu biomedycznym. W szczególności, badania koncentrowano głównie na układach, które mogą, w określonych warunkach, funkcjonować jako nośniki leków. Przy czym koncentrowano się na zbudowaniu układu, który w pH neutralnym (fizjologicznym) miałby zdolność blokowania cząsteczek leku (np. doxorubicyny) natomiast w pH kwaśnym (typowym dla mikrośrodowiska nowotworu) umożliwiałby uwolnienie tych cząsteczek. Ponadto, podjęto badania mające na celu: zbadanie wpływu otoczenia reszty piranozowej (monomer, alkilowany monomer, reszta w łańcuchu, itp.) na elastyczność tej reszty oraz określenie stopnia uwodnienia dendrymeru PAMAM na powierzchni krzemionki.

Powyższe cele zrealizowano poprzez: analizę metodą dynamiki molekularnej ko-adsorpcji cząsteczek leków oraz szeregu cząsteczek barwników na powierzchni i we wnętrzu nanorurek węglowych. Zbadano mechanizm zmian struktury zaadsorbowanej jako funkcji pH środowiska oraz wyznaczono bariery energii swobodnej związane z procesem desorpcji cząsteczek leków i barwników. Stosując symulacje metodą metadynamiki, wyznaczono szereg wartości energii inwersji pierścienia heksopiranoz, dla wszystkich aldoheksoz serii D oraz odpowiednich pochodnych (alkilowane monomery oraz homodi- oraz trimery). Analizowano struktury monowarstw dendrymerów PAMAM zaadsorbowanych na powierzchni krzemionki. Zastosowano w tym celu wieloparametrowy powierzchniowy rezonans plazmonów (SPR) oraz mikrowagę kwarcową z dyssypacją energii (QCM-D).

Najistotniejsze wnioski wynikające z przeprowadzonych badań to: wykazanie, że możliwe jest zbudowanie układu, który w odpowiedzi na kwaśne mikrośrodowisko nowotworu będzie selektywnie uwalniał cząsteczki doksorubicyny. Kluczowym czynnikiem jest wybór odpowiedniej cząsteczki tworzącej ko-adsorbowaną fazę we wnętrzu nanorurki. Spośród kilkunastu zbadanych cząsteczek tylko dwie wykazywały pożądaną właściwość. Wykazano, że funkcjonalizacja heksopiranoz może mieć rozbieżny wpływ na sztywność pierścienia: alkilacja może prowadzić zarówno do systematycznego zwiększenia (anomery β) jak i zmniejszenia (anomery α) jego elastyczności. Z kolei glikozylacja wpływa na dekorelację właściwości inwersyjnych względem tych odpowiadających monomerom. Wyniki QCM-D i MP-SPR wskazują, że 6 generacja dendrymerów PAMAM tworzy bardzo uwodnione warstwy na powierzchni krzemionki. Warstwy dendrymerowe zawierają około 70% wody. W tym przypadku liczba cząsteczek wody przypadających na cząsteczkę dendrymeru wahała się od 10 450 do 9 200. Stopień uwodnienia warstw dendrymerowych wydaje się kluczowym aspektem ich potencjalnej aplikacji. Dane te potwierdziły, że dendrymery są bardzo obiecującymi kandydatami do wielu zastosowań biologicznych.

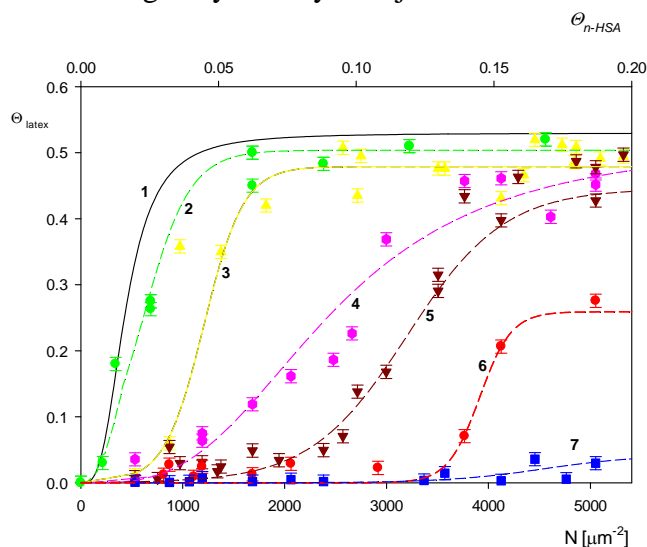
Układy typu nanorurka węglowa/cząsteczka barwnika/cząsteczka leku jak też dendrymery typu PAMAM wykazują użyteczne właściwości jako układy dostarczania leków o możliwym do zaimplementowania czynnikiem wyzwalającym uwalnianie leku, np. zmiana pH. Praktyczne wytworzenie takich układów wymaga jednak dodatkowych badań. Zmiany konformacyjne w pierścieniu heksopiranoz są istotne w ich oddziaływaniu z proteinami oraz wymagają uwzględnienia w metodologiach przewidywania struktury węglowodanów.

Nanostruktury materii miękkiej

14. Topologia i właściwości elektrokinetyczne monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe. Określenie konformacji białek osocza krwi na podstawie pomiarów potencjału przepływu oraz adsorpcji nanocząstek metali szlachetnych i mikrocząstek polimerycznych

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

Pomiary potencjału przepływu oraz kontrolowanej adsorpcji nanocząstek srebra i mikrocząstek polimerowych (lateksów polistyrenowych) zostały użyte do charakterystyki monowarstw albuminy osocza krwi (HSA) na powierzchni miki. Stężenie powierzchniowe albuminy N_a wyznaczano ilościowo przy użyciu obrazowania techniką AFM pojedynczych cząsteczek. Jako układ koloidalny zastosowano suspensję mikrocząstek polimerowych o rozmiarach $0,820 \mu\text{m}$ charakteryzujących się ujemnym ładunkiem powierzchniowym. Stężenie powierzchniowe (pokrycie) mikrocząstek wyznaczano przy pomocy mikroskopii optycznej oraz mikroskopii sił atomowych. Natomiast właściwości elektrokinetyczne monowarstw oraz ich stabilność były określane przy użyciu metody potencjału przepływu. Przeprowadzono obszerne pomiary kinetyki osadzania mikrocząstek dla różnych sił jonowych, w zależności od stężenia powierzchniowego albuminy (stopnia pokrycia). W sposób systematyczny badano również wpływ pH na mechanizm osadzania mikrocząstek. Wyniki przedstawione na Rysunku 1 dla pH 5.5 wskazują, że dla siły jonowej powyżej 4×10^{-2} efektywność osadzania mikrocząstek wzrasta raptownie ze wzrostem pokrycia albuminy, co umożliwia precyzyjne wyznaczenie pokrycia albuminy w warunkach *in situ*. Natomiast dla niższych sił jonowych, gdy grubość podwójnej warstwy elektrycznej staje się porównywalna z rozmiarami cząsteczki białka osadzanie mikrocząstek jest nieefektywne, co zgadza się z modelem uśrednionego pola (teorią DLVO). Uzyskane wyniki mogą być wykorzystane w sposób praktyczny do wytwarzania monowarstw białek o ściśle zdefiniowanym pokryciu i orientacji cząsteczek, co umożliwia efektywne przeprowadzenie testów immunologicznych o wysokiej czułości.



Rysunek 1. Zależność pokrycia mikrocząstek polimerowych od stężenia powierzchniowego HSA (dolna oś pozioma) oraz pokrycia (górna oś pozioma) dla różnych sił jonowych (pH 5.5). Linia ciągła 1 przedstawia graniczne wyniki teoretyczne obliczone z modelu fluktuacyjnego dla osadzania mikrocząstek na powierzchniach o dodatnim ładunku. Punkty przedstawiają dane doświadczalne uzyskane przy pomocy metody AFM i mikroskopii optycznej dla: (●), $0,15 \text{ M}$; (▲), $5 \times 10^{-2} \text{ M}$; (■), $4 \times 10^{-2} \text{ M}$; (●), $3 \times 10^{-2} \text{ M}$; (●), $2 \times 10^{-2} \text{ M}$; (■), 10^{-2} M . Linie przerywane przedstawiają interpolacje danych doświadczalnych.

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

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

Wielowarstwowa adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchni międzyfazowej ciecz-ciało stałe prowadzi do spontanicznej formacji cienkiego filmu porowatego, który ma znaczący wpływ na transport jonów z objętości roztworu do powierzchni adsorpcji. Podstawowym celem badań była dogłębna analiza właściwości transportowych kilku przykładowych wielowarstw cząstek kulistych, otrzymanych metodą adsorpcji warstwa-po-warstwie. Badania miały również na celu ocenę możliwości wykorzystania wielowarstw cząstek kulistych do modelowania profilu stężenia substancji chemicznych przy granicy międzyfazowej ciecz-ciało stałe. Ponadto, poprzez porównanie wyników teoretycznych i eksperymentalnych, planowano określenie dokładności stosowanych przez nas metod teoretycznych.

Do syntezy wielowarstw cząstek koloidalnych wykorzystano naczynko dyfuzyjne. Proces adsorpcji wielowarstwy przeprowadzono metodą warstwa-po-warstwie wykorzystując dodatnio i ujemnie naładowane, monodispersyjne cząstki lateksu polistyrenowego o średnicy 800 nm. Wielowarstwy zaadsorbowano na wypolerowanej powierzchni złotych elektrod dyskowych. W trakcie adsorpcji utrzymywano w zawieszynie cząstek koloidalnych stosunkowo duże stężenie elektrolitu, co pozwoliło na ograniczenie zasięgu oddziaływań elektrostatycznych między cząstkami do niewielkich odległości. Następnie, stosując woltamperometrię cykliczną i technikę wirującej elektrody dyskowej, dla każdej z wielowarstw określono ilościowo jej właściwości transportowe poprzez wyznaczenie równoważnej grubości spoczywającej warstwy roztworu. Po zakończeniu pomiarów elektrochemicznych wysuszono wielowarstwy i zmierzono ich masy. Pozwoliło to na obliczenie średniego pokrycia powierzchni pojedynczej warstwy. Znając ten parametr wygenerowano wirtualne odpowiedniki wielowarstw otrzymanych w eksperymentach. W tym celu wykorzystano program komputerowy oparty na uogólnionym modelu przypadkowej adsorpcji sekwencyjnej. Dla każdej z wirtualnych wielowarstw obliczono następnie szereg parametrów i funkcji, takich jak średnia grubość wielowarstwy, równoważna grubość spoczywającej warstwy roztworu, przestrzenne rozkłady porowatości, krętości i dyfuzyjności oraz profil stężenia jonów dyfundujących przez wielowarstwę. Znając teoretycznie obliczony rozkład dyfuzyjności i eksperymentalnie wyznaczoną równoważną grubość spoczywającej warstwy roztworu określono także średnią grubość wielowarstw badanych w naszych eksperymentach.

Uzyskane wyniki wskazują, że przestrzenne rozkłady porowatości, krętości i dyfuzyjności wielowarstw cząstek kulistych wykazują charakterystyczne oscylacje, zależne od pokrycia powierzchni i zanikające ze wzrostem odległości od kolektora. Mimo to obliczony profil stężenia jonów w wielowarstwie jest praktycznie liniowy. Ten, pozornie sprzeczny z intuicją, wynik jest konsekwencją dużej porowatości wielowarstw monodispersyjnych cząstek kulistych. Wynik ten sugeruje, że w wielu wypadkach profile stężenia w niejednorodnych cienkich warstwach mogą być wystarczająco dokładnie opisane za pomocą uproszczonych modeli teoretycznych. Sugeruje on ponadto, że w celu uzyskania nieliniowych profili stężenia konieczne jest użycie cząstek polidispersyjnych lub wielomodalnych, które tworzą znacznie mniej porowate struktury. Różnice między grubościami wielowarstw wyznaczonymi teoretycznie i eksperymentalnie są niewielkie i nie przekraczają 2%. Otrzymana dobra zgodność wyników teoretycznych i eksperymentalnych potwierdza słuszność wykorzystywanego przez nas modelu teoretycznego.

Wyniki przeprowadzonych badań mogą być wykorzystane do produkcji funkcjonalnych nanomateriałów, takich jak membrany, katalizatory heterogeniczne, powierzchnie antyrefleksyjne czy elementy optyczne. Ujawniony istotny wpływ polidispersyjności adsorbowanych cząstek na parametry transportowe wielowarstw sugeruje, że zależność ta zasługuje na dokładniejszą analizę.

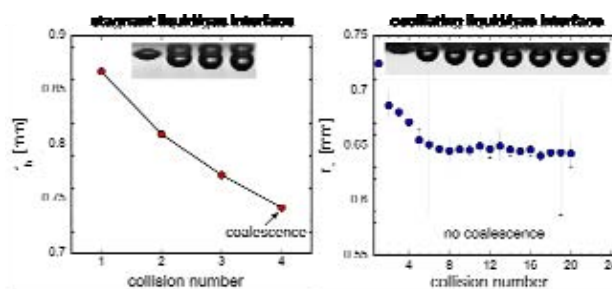
16. Wpływ energii kinetycznej na kinetykę koalescencji pęcherzyków na swobodnej powierzchni czystych cieczy

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

Celem zadania było określenie wpływu energii kinetycznej związanej z ruchem pęcherzyka na kinetykę jego koalescencji na powierzchni czystych cieczy. Jest to zagadnienie ważne z punktu widzenia wielu procesów, podczas których dochodzi do dynamicznych zderzeń pomiędzy powierzchniami ciecz/gaz (rozdziały fazowe, tworzenie pian, etc.), ponieważ prawdopodobieństwo i kinetyka koalescencji istotnie wpływa na ich przebieg i efektywność. Badania, skupiające się na elementarnych zjawiskach decydujących o stabilności ciekłych filmów w warunkach dynamicznych, miały na celu wyznaczenie czynników decydujących o prawdopodobieństwie wystąpienia oraz liczbie odbić pęcherzyków gazowych od powierzchni ciecz/gaz przed pęknięciem. W prowadzonych badaniach używany był unikatowy zestaw eksperymentalny, który umożliwiał obserwację dynamicznych zjawisk zachodzących podczas zderzeń pęcherzyków gazowych z powierzchnią ciecz/gaz pozostającą w spoczynku lub też wibrującą z kontrolowanym przyspieszeniem (częstotliwością i amplitudą).

W celu wyznaczenia czynników decydujących o prawdopodobieństwie wystąpienia oraz liczbie odbić pęcherzyków gazowych od powierzchni ciecz/gaz przed ich pęknięciem przeprowadzone zostały eksperymenty oraz obliczenia teoretyczne dla cieczy o różnych właściwościach fizykochemicznych (woda, oleje silikonowe). Badania miały na celu określenie ilości odbić pęcherzyków o różnych promieniach (R_b z zakresy 0.31 - 0.87 mm) od swobodnej i wibrującej powierzchni ciecz/gaz oraz wyznaczenie czasu koalescencji (t_c), mierzonego od momentu pierwszego uderzenia pęcherzyka w powierzchnię do chwili jego pęknięcia. Ponadto, dla każdej z badanych wartości R_b określano wartości tzw. granicznych przyspieszeń wibrującej powierzchni ciecz/gaz, koniecznych do wydłużenia wartości t_c .

Wykazano, że wartości t_c , determinowane czasem odbić pęcherzyka od powierzchni ciecz/gaz mogą być znacząco wydłużone, z kilkunastu milisekund w przypadku powierzchni spoczywającej do kilkuset milisekund dla powierzchni wibrującej z określoną częstotliwością. Związane było to z faktem, że wymuszane w sposób kontrolowany oscylacje powierzchni ciecz/gaz uzupełniały ilość energii w układzie, która rozpraszana była podczas ruchu oraz odbić pęcherzyka. Powodowało to, że deformacja pęcherzyka, która w układzie bez oscylacji malała z każdym zderzeniem, była praktycznie stała dla powierzchni oscylującej (patrz rys. 1). Stały był również promień powstającego ciekłego filmu, co powodowało, że nie osiągał on krytycznej grubości pęknięcia w czasie kolizji pęcherzyk-powierzchnia. Podobne, wstępne badania wykonane dla powierzchni ciecz/ciało stałe udowodniły, że zjawisko to jest uniwersalne. Spektakularne wydłużenie czasu życia było obserwowane nawet w przypadku zderzeń pęcherzyka z powierzchnią stałą o wysokim stopniu hydrofobowości.



Rysunek 1. Promień pęcherzyka (horyzontalny) podczas jego zderzeń ze spoczywającą i oscylującą powierzchnią ciecz/gaz.

Uzyskane wyniki wskazują na bardzo istotne znaczenie oddziaływań hydrodynamicznych w kinetyce wyciekania ciekłych filmów powstających na różnych powierzchniach międzyfazowych, których stabilność ma decydujące znaczenie w procesie koalescencji oraz tworzeniu kontaktu trójfazowego. Uzyskane dane mogą być wykorzystane jako jeden z elementów optymalizacji warunków procesu dyspersji gazu w cieczy (np. podczas tworzenia pian lub rozdziału flotacyjnego), podczas którego istnieje możliwość kontroli przepływu, a w konsekwencji relacji energetycznych układu, wielkości oddziaływań hydrodynamicznych oraz szybkość pęknięcia filmów pianowych i zwilżających.

17. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

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

Głównym celem realizacji zadania było opracowanie podstaw naukowych metodyki kontrolowanego wytwarzania funkcjonalnych wielowarstwowych cienkich filmów zawierających różnego rodzaju polielektrolity oraz hydrofobowe nanocząstki i lipidy.

W ramach prowadzonych prac badawczych określano wpływ wybranych polielektrolitów, stosowanych w postaci wielowarstwy jako podkładki do osadzania biwarstw lipidowych, na tworzenie i właściwości biwarstw, składających się z mieszaniny syntetycznych fosfolipidów POPC:POPE. Dodatkowo, w strukturę biwarstwy lipidowej wbudowano hydrofobowe, fluorescencyjne nanocząstki o rozmiarach w zakresie od 2.7nm do 5.4nm, uzyskując modelowe filmy nanokompozytowe, składające się z substratów o różnej hydrofobowości. Prowadzone badania obejmowały charakterystykę zwilżalności wybranych filmów polielektrolitowych poprzez pomiar kątów zwilżania metodą bezpośredniej analizy profilu siedzącej kropli. Pomiary te posłużyły do wyznaczenia swobodnej energii powierzchniowej (SFE) wg modelu Owensa. Przy użyciu mikrowagi kwarcowej monitorowano adsorpcję liposomów i tworzenie biwarstw lipidowych na powierzchni filmów polielektrolitowych. Wbudowywanie nanocząstek w strukturę biwarstw lipidowych wykrywano za pomocą spektrofluorymetru, rejestrując widma emisji w zakresie 350-500nm, zarówno dla zawiesiny liposomów z nanocząstkami, jak i dla zaadsorbowanych biwarstw lipidowych z nanocząstkami, osadzonych na filmach polielektrolitowych.

Do najważniejszych osiągnięć możemy zaliczyć opracowanie wpływu rodzaju filmu polielektrolitowego na tworzenie na jego powierzchni biwarstwy lipidowej, co pozwala na kontrolę fuzji liposomów oraz struktury otrzymanej biwarstwy w zależności od użytej pary polijonów. Kolejne osiągnięcie to opracowanie metody tworzenia funkcjonalnych wielowarstw ze składników o różnej hydrofobowości. Daje to możliwość wbudowania hydrofobowych nanocząstek w hydrofilowe filmy dla otrzymania funkcjonalnych nanokompozytów. Zoptymalizowano tworzenie filmów polielektrolitowo-lipidowych z nanocząstkami wewnątrz alkilowej części biwarstwy lipidowej. Udowodniono, iż cząstki o rozmiarach z zakresu od 2.7nm do 5.4nm, mogą być wbudowane w biwarstwy z badanych fosfolipidów. Dodatkowo, ilość cząstek jakie są inkorporowane, jest dostatecznie duża, aby wykrywać ich obecność w zaadsorbowanych biwarstwach za pomocą spektrofluorymetrii, co tylko potwierdza potencjał aplikacyjny badanych filmów nanokompozytowych.

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

Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

18. Modelowanie warunków środowiska i zużycia energii w budynkach przechowujących zasoby dziedzictwa kultury

(prof. Roman Kozłowski, dr Leszek Krzemień, dr Marcin Strojecki)

Celem badań jest oszacowanie buforującego wpływu higroskopijnych obiektów zabytkowych na mikroklimat panujący w budynkach, w których obiekty te są przechowywane. Analiza obejmuje różne typy budynków bibliotek, archiwów i muzeów, które charakteryzują się odmiennymi, kluczowymi z punktu widzenia kontroli mikroklimatu, parametrami. Są to szczelność przegród budowlanych mierzona przez szybkość wymiany powietrza między wnętrzem a przestrzenią zewnętrzną, oraz sposób użytkowania, szczególnie strategia ogrzewania pomieszczeń. Badania służą również ocenie wpływu zbiorów na zużycie energii w tych budynkach, w zależności od przyjętego scenariusza kontroli mikroklimatu.

Szczegółowej analizie poddano buforujący wpływ obiektów drewnianych przechowywanych w magazynach muzealnych. Prace badawcze podzielono na dwa etapy, w których wykorzystano różne narzędzia symulacji numerycznej. W pierwszym etapie, przy użyciu programu COMSOL Multiphysics, przygotowano komputerowy model dyfuzji i adsorpcji pary wodnej przez obiekty drewniane o kształcie prostopadłościanu, przybliżającym drewniane rzeźby, których powierzchnie są równoległe do osi pnia. Pod uwagę wzięto różne rozmiary rzeźb w oparciu o statystykę obiektów przechowywanych w magazynach Działu Sztuki Dawnej Muzeum Narodowego w Krakowie, znajdujących się w Pałacu Biskupa Erazma Ciołka. Prostopadłościany o wymiarach 200x250x600, 250x300x1200, 250x450x1450 mm³ imitowały rzeźby odpowiednio małe, średnie i duże. W modelowaniu wzięto pod uwagę różne stopnie pokrycia rzeźb powłokami malarskimi lub złoceniami nieprzepuszczalnymi dla pary wodnej. W modelowaniu dopasowano obliczone dynamiczne zmiany zawartości wody do zmierzonych doświadczalnie dla drewnianych imitacji rzeźb w kształcie wydrążonego walca przez modyfikację współczynnika dyfuzji pary wodnej w drewnie. Z uwagi na fakt, iż oprogramowanie WUFI®Plus, zastosowane w drugim etapie badań do modelowania mikroklimatu i zużycia energii w budynkach, może symulować sprzężony transport ciepła i wilgoci tylko dla przypadków jednowymiarowej dyfuzji tych wielkości, prostopadłościenne modele rzeźb zredukowano do przypadku jednowymiarowej sorpcji przez tylko jedną powierzchnię, modyfikując geometrię oraz ponownie dopasowując współczynnik dyfuzji pary wodnej w drewnie.

Tak przygotowany jednowymiarowy model wprowadzono do oprogramowania WUFI®Plus w celu symulacji mikroklimatu i szacowanie zużycia energii w budynkach. Kolejnym zadaniem zakończonym w okresie sprawozdawczym była szczegółowa analiza wpływu dużych zbiorów papierowych przechowywanych w magazynach bibliotecznych na zużycie energii. Obliczenia zużycia energii przeprowadzono dla kilku scenariuszy kontroli klimatu opartych o międzynarodowe normy muzealne. Obliczenia te pokazały, że energia potrzebna do nawilżania i osuszania powietrza w budynkach zmniejsza się o co najmniej 21% w przypadku typowego wypełnienia modułu magazynowego zbiorami papierowymi wynoszącego 16% jego objętości, w stosunku do pomieszczenia pozbawionego zbiorów papierowych.

Opracowane narzędzia symulacji numerycznych dostarczają szeroko pojętemu środowisku konserwatorskiemu informacji o praktycznym charakterze, pozwalających na opracowanie lepszych strategii ochrony zbiorów. Poznanie rzeczywistego mikroklimatu wewnątrz instytucji przechowujących zasoby dziedzictwa kultury pozwoli z jednej strony na ocenę korzystnego buforującego wpływu zbiorów na fluktuacje mikroklimatu, z drugiej pozwoli na określenie ewentualnych działań o charakterze prewencyjnym w przypadku zagrożenia samych obiektów nadmiernymi przepływami pary wodnej i ciepła.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "SONATA BIS"

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

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

(kierownik projektu: prof. Tomasz Pańczyk)

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. W kolejnym etapie badań przeanalizowano najbardziej obiecujące struktury pod kątem wpływu oddziaływań wzajemnych pomiędzy nośnikami i ich wpływu na modulację stabilności cząsteczek leków. Oddziaływania wzajemne czy też oddziaływania z makrocząsteczkami obecnymi w środowisku fizjologicznym mają bowiem kluczowe znaczenie. Nadal, jako czynnik wyzwalający uwalnianie leku z nośnika wykorzystywano zjawisko zmiany pH tkanki z fizjologicznego 7.4 na kwaśne ok. 5.5 jakie zachodzi w obrębie guza.

Badaniom poddano dwa typy układów: (i) dublet nanorurek węglowych zablokowanych kowalencyjnie nanocząstkami złota pokrytymi łącznikami zawierającymi wiązania hydrazonowe oraz (ii) układy nanorurek węglowych funkcjonalizowanych biokompatybilnym polimerem zawierającym dodatkowo czynnik celujący (kwas foliowy). Te układy wykorzystywały zjawisko blokowania cząsteczek leku przez cząsteczki barwników o pK_a w granicach 5-7.

Wyniki uzyskane dla przypadku blokowania nanorurki przez kowalencyjnie związane nanocząstki złota prowadzą do jeszcze bardziej obiecujących wniosków. Stwierdzono, że obecność oddziaływań wzajemnych ułatwia odrywanie nanocząstek złota w środowisku kwaśnym. Obserwowano spontaniczną deasocjację nanorurek i nanocząstek złota. Jednocześnie stwierdzono, że zwiększenie rozmiarów układu prowadzi do coraz silniejszego wiązania nanocząstek złota i istnieje możliwość całkowitego zablokowania deasocjacji nanocząstek. Problem ten został szczegółowo przeanalizowany i wskazane zostały sposoby ograniczenia zakresu oddziaływań dyspersyjnych w układzie. Najkorzystniejszym podejściem wydaje się być zróżnicowanie rozmiarów (średnic) nanorurek oraz nanocząstek złota. Wyniki obliczeń dotyczących wpływu funkcjonalizacji powierzchni nanorurki biokompatybilnym polimerem prowadzą do wniosku, że obecność warstewki polimeru o nawet niewielkiej gęstości zapobiega aglomeracji nanorurek w środowisku wodnym. Obecność warstewki polimeru ma również bardzo silny wpływ na zachowanie się układu w którym do blokowania leku wewnątrz nanorurki zastosowano cząsteczki barwników. Wyniki obliczeń wskazują, że stan układu w pH neutralnym jest dodatkowo stabilizowany. W pH kwaśnym nadal dochodzi do spontanicznego uwalniania cząsteczek barwników lecz cząsteczki doxorubicyny są wówczas silnie blokowane przez łańcuchy polimeru zlokalizowane na czołach nanorurki. Zatem, obecność polimeru sprawia, że układ nie będzie w stanie uwolnić cząsteczek leku w miejscu docelowym. Problem ten przeanalizowano w sposób jakościowy wskazując możliwe sposoby jego wyeliminowania w układach realizowanych praktycznie.

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 enosomach 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 zaprojektowywanie enzymów

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

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

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. Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury tych białek oraz szczegółowych mechanizmów ich reakcji katalitycznych.

W ramach prowadzonych prac doświadczalnych testowano różne warunki ekspresji białka oraz optymalizowano warunki krystalizacji białek. W ramach prac obliczeniowych kontynuowano badania kwantowo-chemiczne nad czynnikami determinującymi regioselektywność reakcji oraz symulacje dynamiki molekularnej dla kompleksów enzym-substrat.

Wstępnie zoptymalizowano warunki ekspresji osobno dla każdego z białek, a także wyznaczono warunki oczyszczania, oraz wytypowano potencjalne warunki krystalizacji.

Uzyskane wyniki powinny pozwolić na otrzymanie kryształów i wyznaczenie struktury krystalicznej, która posłuży do wykonania badań obliczeniowych dla całej rodziny białek oraz zaprojektowania mutacji potencjalnie zmieniających specyficzność substratową badanych enzymów.

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

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

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

Parametryzacja pola siłowego GROMOS dla cząsteczki tetrahydrofuranu

Celem badań była szczegółowa parametryzacja cząsteczki tetrahydrofuranu (THF) w ramach pola siłowego typu *united-atoms* GROMOS. Cząsteczka THF zawiera nasycony pięcioczłonowy pierścień złożony z czterech atomów węgla oraz jednego atomu tlenu, będący charakterystycznym motywem dla wszystkich cząsteczek furanoz. Ponadto, w odróżnieniu od pierścieni piranozowych, pierścień furanozowy posiada wysoki stopień elastyczności, dość dobrze scharakteryzowany na drodze badań eksperymentalnych (NMR).

Bazując na obliczeniach kwantowo-mechanicznych, wyznaczono profile energii odpowiadające zmianom wartości poszczególnych kątów torsyjnych w pierścieniu THF a także pełnej pseudorotacji ww. pierścienia. Dopasowane parametry klasycznego pola siłowego zwalidowano za pomocą serii symulacji (metodą dynamiki molekularnej) w obecności rozpuszczalnika (chloroform, acetonitryl oraz woda) oraz porównanie wyników z literaturowymi danymi eksperymentalnymi (tj. stałymi sprzężenia NMR protonów wicynalnych). Do porównania wykorzystano zarówno klasyczne równanie Karplusa (z poprawkami Haasnoota-Altony) oraz równanie Wu-Cremiera (wyprowadzone dla THF). Niezależnie od układu, różnice pomiędzy eksperymentem a symulacją nie przekraczają 1 Hz, co wskazuje na bardzo wysoką jakość parametrów oraz pozwala na użycie ich do dalszych etapów parametryzacji (hydroksylowana oraz alkilowana cząsteczka THF).

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 [2011-2016]

(kierownik projektu: dr Monika Góral-Kurbiel)

Tematyka projektu dotyczyła polimerowych ogniw paliwowych, w których surowcami do wytworzenia energii elektrycznej są wodór i tlen. Rozwój technologii ogniw paliwowych wynika z ich zalet, m.in. nie przyczyniają się one do pogłębienia efektu cieplarnianego, a produktem ubocznym ich pracy jest woda. Jednakże komercjalizacja ogniw paliwowych napotyka na bariery takie jak wysoki koszt wytworzenia energii i zbyt niska stabilność pracy. Celem projektu były badania nad doбором efektywnego materiału dla katalizatora do katodowej reakcji redukcji tlenu ORR (*ang. Oxygen Reduction Reaction*) w ogniwie paliwowym. Zaplanowano zastosowanie nanocząstek PdPt jako fazy metalicznej, a jako nośnika kompozytu hybrydowego zawierającego heteropolikwasu (HPA) osadzone w matrycy polimeru przewodzącego – polipirolu (PPY). W poprzednich etapach badano katalizatory palladowo-platynowe osadzone w matrycy PPY. Zastosowanie układu bimetalicznego w miejsce powszechnie stosowanej platyny miało na celu zmniejszenie kosztów katalizatora oraz zwiększenie jego odporności na zatrucie, np. przez CO.

Badania przeprowadzone w 2016 roku dotyczyły modyfikacji katalizatorów palladowych oraz palladowo-platynowych przy użyciu HPA typu Keggina, $H_3PW_{12}O_{40}$ i $H_3PMo_{12}O_{40}$ oraz Dawsona, $H_6P_2W_{18}O_{62}$. Wykorzystano nanokompozyty polipirol-heteropolikwas (PPY-HPA) otrzymane w poprzednim etapie projektu przez polimeryzację pirolu w obecności wyżej wymienionych HPA. Kompozyt PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$ użyto do syntezy katalizatora Pd/PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$. Materiały charakteryzowano metodami BET, XRD, XPS, FTIR i TEM. Użycie kompozytu hybrydowego Pd/PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$ zapewniło dobry transfer elektronów i protonów. Ponadto, silne oddziaływania elektronowe wynikające z obecności polimeru przewodzącego PPY zaowocowały modyfikacją właściwości elektronowych nanocząstek Pd, skutkującą wzrostem aktywności Pd/PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$ w porównaniu z Pd/PPY. Aktywność elektrokatalityczną tych materiałów w ORR określono w 0,5 M H_2SO_4 przy użyciu wirującej elektrody dyskowej z pierścieniem. Nastąpiło przesunięcie potencjału półfali, $E_{1/2}$ w kierunku dodatnich wartości i wzrost gęstości prądu. Dodatkowo w obecności Pd/PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$ ilość niepożądanego produktu pośredniego H_2O_2 była mniejsza o ok. 50 % w porównaniu do Pd/PPY.

W ostatnim etapie badań nanocząstki PdPt (o optymalnym składzie Pd:Pt=50:50 wyznaczonym na podstawie wcześniej przeprowadzonych badań) na kompozyty hybrydowe PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$, PPY- $H_3PW_{12}O_{40}$ i PPY- $H_6P_2W_{18}O_{62}$. Tylko dla katalizatora Pd₅₀Pt₅₀/PPY- $H_3PMo_{12}O_{40}$ obserwowano wzrost aktywności w reakcji ORR w porównaniu z katalizatorem Pd₅₀Pt₅₀/PPY bez heteropolikwasu. Nastąpiło przesunięcie $E_{1/2}$ w kierunku dodatnich wartości o ok. 10 mV, z zachowaniem ilości wytworzonego H_2O_2 , przy nieznacznym obniżeniu gęstości prądu. Wyniki te są zgodne z zależnościami uzyskanymi wcześniej dla Pd₅₀Pt₅₀/PPY modyfikowanego poprzez wprowadzenie heteropolikwasów do zawiesiny elektrokatalitycznej katalizatora (badania przeprowadzone w roku 2015). Wyniki pokazały, że spośród trzech proponowanych heteropolikwasów, $H_3PMo_{12}O_{40}$ okazał się najbardziej efektywny. Rola $H_3PMo_{12}O_{40}$ wynika z jego właściwości, takich jak: struktura elektronowa anionu Keggina związana z obecnością molibdenu, szybka dynamika transportu ładunku oraz kwasowe właściwości. Dodatkowo analiza XPS pokazała, że na aktywację nanocząstek PdPt w ORR mogą mieć wpływ oddziaływania elektronowe pomiędzy $H_3PMo_{12}O_{40}$ a cząstkami metalu, ułatwiające proces elektrodowy.

Przeprowadzone badania miały charakter badań podstawowych, niemniej mogą przyczynić się do lepszego poznania czynników odpowiedzialnych za aktywność katalizatorów w ORR. W efekcie można oczekiwać wpływu uzyskanych wyników na badanie aktywności w innych reakcjach elektrokatalitycznych, np. elektrotleniania kwasu mrówkowego, metanolu, czy etanolu.

2. Wcelowane dostarczanie leków-synteza i funkcjonalizacja nanoosników

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 nanoosnikach, 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 cytotoxyczności otrzymanych nośników oraz zweryfikowanie selektywnego działania przygotowanych kapsulek 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 Uniwersytetu Jagiellońskiego.

W 2016 roku skupiono się na preparatyce oraz modyfikacji nanokapsulek zawierających hydrofobowe leki przeciwnowotworowe dla celowania pasywnego i aktywnego do guzów nowotworowych. Nanokapsułki otrzymano metodą opracowaną w naszym laboratorium, tj. bezpośrednio enkapsulacji kropli emulsyjnej w biokompatybilnych powłokach polielektrolitowych. Otrzymano nośniki zawierające leki przeciwnowotworowe np. kamptotecyna o średnim rozmiarze 100nm, które następnie zmodyfikowano poprzez pegylację. Do tego celu wykorzystano pegylowany polielektrolit PLL-g-PEG oraz PLL-g-PEG-BIOTIN. Przeciwciała anti-CEA przyłączono poprzez mostek streptawidynowy do łańcuchów PEG-BIOTIN.. Uzyskane wyniki stanowią podstawę dla kontynuacji badań w celu zastosowania nanoosników w terapiach antynowotworowych.

3. 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 (enzymy 'EBDH-like').

W celu uzyskania materiału biologicznego do dalszych badań ponownie przeprowadzono hodowlę *S. denitrificans* w dużej skali (100 l) u partnera naukowego w Poznaniu. W wyniku 1-tygodniowej hodowli uzyskano 486 g mokrej masy komórkowej zawierającej aktywność S25DH. Preparatywne oczyszczanie heterotrimerycznego ($\alpha\beta\gamma$) enzymu prowadzono wcześniej opracowaną 3-etapową metodą chromatograficzną. Analiza sekwencji aminokwasowej oczyszczonego enzymu wykazała zanieczyszczenie podjednostki α przez co najmniej cztery izoenzymy zawierające podjednostki α S25DH-like. Oczyszczanie enzymu z zastosowaniem różnych frakcji białek *S. denitrificans*: i) frakcja błonowa, ii) frakcja błonowa i białka rozpuszczalne, iii) tylko białka rozpuszczalne miało pozwolić na odseparowanie różnych izoform podjednostki α . Rozdzielone za pomocą elektroforezy żelowej białka podjednostki α z poszczególnych frakcji zostały przekazane do ilościowych i jakościowych analiz sekwencji aminokwasowych metodą ESI-MS/MS na AGH. Ponadto wykorzystując system nadekspresji S25DH opracowany w równoległym projekcie, wyprodukowano rekombinowane S25DH oraz S25DH-like z $\alpha 2$. W teście aktywności z substratem natywnych cholest-4-en-3-onem wykazano tworzenie 25-hydroksy produktu zarówno dla rekombinowanej S25DH jak i S25DH-like. Wykazano tym samym, że co najmniej jeden z izoenzymów S25DH zdolny jest katalizować taką samą reakcję jak S25DH.

Stosując oczyszczony, homogeny S25DH wykonano wstępne badania metodą stopped-flow oraz izotermiczne miareczkowanie kalorymetryczne (ITC). Metodą stopped-flow badano reakcję utlenionego enzymu z cholest-4-en-3-onem bez reutleniacza co pozwoliło prześledzić szybkość redukcji poszczególnych centrów redoksowych w enzymie (w szczególności centrów [Fe-S] i hemu). Niestety ze względu na śladowe ale istotne ilości reutleniacza ($[\text{Fe}(\text{Cp})_2]\text{BF}_4$) obecnego po oczyszczeniu wyniki okazały się niejednoznaczne i wymagana będzie ponowna seria eksperymentów z białkiem oczyszczonym za pomocą sączenia molekularnego lub dializy. Z kolei w eksperymentach ITC wyznaczono ciepło reakcji hydroksylacji oraz przebadano możliwość pomiaru kinetycznego metodą ITC. Niestety nie wyeliminowano istotnych problemów z ciepłem związanym z mieszaniem się 2-metoksyetanolu z mieszaniną reakcyjną.

W oparciu o opracowany model homologiczny α S25DH przygotowano modele izoform, wykazując ich różnice strukturalne w obrębie centrum aktywnego oraz kieszeni wiążącej. Analogiczne porównanie przeprowadzono względem referencyjnej struktury EBDH. Dla wybranych modeli α S25DH w kompleksie z substratem natywnym stosując modele QM oraz QM:MM przeprowadzono obliczenia różnych możliwych ścieżek reakcji: i) homolitycznej aktywacji C-H z rodnikowym produktem przejściowym lub ii) heterolitycznej aktywacji C-H z karbokationowym produktem przejściowym. Bardziej prawdopodobna okazała się ścieżka zakładająca homolityczną aktywację, a wynik ten został potwierdzony dla modeli klastrów QM zgodnością eksperymentalnie wyznaczonego kinetycznego efektu izotopowego (KIE) dla 25,26,26,26-[2H]-cholesterolu z iKIE oszacowanymi teoretycznie dla poszczególnych barier oraz alternatywnych mechanizmów reakcji.

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

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

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

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

W okresie sprawozdawczym przeprowadzono badania mające na celu określenie wpływu i wzajemnych relacji pomiędzy promieniem pęcherzyka (R_b), napięciem powierzchniowym cieczy oraz wartościami granicznego przyspieszenia związanego z drganiem powierzchni ciecz/gaz na prawdopodobieństwo przedłużenia czasu życia uderzających pęcherzyków. Eksperymenty prowadzone były w czystej wodzie oraz czystym oleju silikonowym o ściśle określonych właściwościach fizykochemicznych, dla 7 rozmiarów kapilar, na których generowane były w sposób kontrolowany pęcherzyki powietrza. Ze względu na różnice w napięciu powierzchniowym badanych cieczy, dla jednakowego zakresu średnic kapilar (0.025-0.15 mm) wartości R_b w wodzie i oleju zmieniały się odpowiednio w zakresie 0.51 - 0.87 mm oraz 0.31-0.60 mm.

Wykazano, że wartość granicznego przyspieszenia związanego z kontrolowanym drganiem powierzchni ciecz/gaz ściśle zależy od wielkości pęcherzyka (jego promienia - R_b) i właściwości fizykochemicznych cieczy (napięcia powierzchniowego). Niezależnie od rodzaju cieczy, wartość granicznego przyspieszenia w funkcji częstotliwości drgań rosła wraz ze spadkiem wartości R_b . Ponadto, porównując wartości przyspieszeń pęcherzyków o zbliżonych rozmiarach, ale wytworzonych w różnych cieczach, stwierdzono, że przyspieszenie graniczne jest znacznie mniejsze dla cieczy o niższym napięciu powierzchniowym. Uzyskane wyniki potwierdziły hipotezę roboczą postulującą, że prawdopodobieństwo przedłużenia „czasu życia” pęcherzyka na powierzchni ciecz/gaz związane jest z deformacją pęcherzyka podczas jego odbicia od powierzchni (w momencie kolejnych zderzeń), która warunkuje rozmiar promienia filmu ciekłego, rozdzielającego powierzchnię pęcherzyka od powierzchni cieczy. Zdolność deformacji natomiast zależy ściśle od wartości ciśnienia Laplace'a (Δp), tj. ciśnienia wewnątrz pęcherzyka. Im jest ono większe, tym wyższe wartości przyspieszeń należy zastosować (pęcherzyk musi uderzać w powierzchnię z większą siłą), aby stopień jego deformacji, a co za tym idzie promień utworzonego filmu ciekłego, był odpowiednio duży. Ciśnienie Laplace'a jest tym mniejsze im mniejsze jest napięcie powierzchniowe cieczy lub też im większa jest wartość R_b . Dokładna analiza odpowiednich wartości Δp oraz pozostałe uzyskane wyniki są bardzo mocnym dowodem na słuszność postulowanego mechanizmu odbicia pęcherzyka od powierzchni międzyfazowej.

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

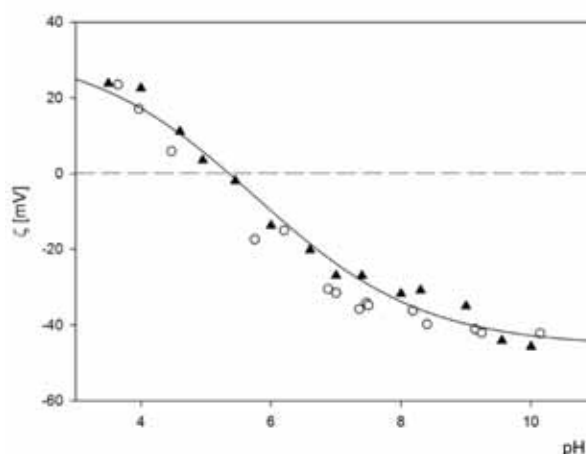
Projekt badawczy "Sonata" NCN 2014/13/D/ST4/01846 [2015-2017]

(kierownik projektu: dr Monika Wasilewska)

Testy immunologiczne to wydajne systemy bioanalityczne wykorzystujące czułość i specyficzność oddziaływań antygen - przeciwciało, w celu wykrywania i ilościowego oznaczenia określonego analitu obecnego w próbce. Najpowszechniej stosowanymi przeciwciałami są immunoglobuliny typu G (IgG).

Prowadzone badania miały na celu określenie mechanizmów adsorpcji przeciwciała monoklonalnego IgG (anty-fibrynogen) na mikrosferach polistyrenowych. Do pomiarów ruchliwości elektroforetycznej mikrosfer z zaadsorbowanymi przeciwciałami wykorzystano metodykę *in situ* LDV (Laser Doppler Velocimetry). Pokrycia maksymalne białka określono wykorzystując mikroskopię sił atomowych (AFM). Przeprowadzone cykle pH pozwoliły na określenie właściwości kwasowo-zasadowych monowarstwy IgG. Dane doświadczalne zinterpretowano ilościowo w odniesieniu do ogólnego modelu elektrokinetycznego. Stosując powyższe metodyki badawcze przeprowadzono również szereg eksperymentów mających na celu określenie mechanizmu adsorpcji albuminy ludzkiej HSA na monowarstwy IgG.

Uzyskane wyniki pozwoliły na sformułowanie następujących wniosków. Stwierdzono, że adsorpcja immunoglobulin G na mikrosferach polistyrenowych zachodzi w sposób nieodwracalny. Utworzone monowarstwy są stabilne w szerokim zakresie pH od 3,5 do 10.



Rysunek 1. Zależności potencjału zeta monowarstw IgG na mikrosferach polistyrenowych w funkcji pH od 3,5 do 10 i spowrotem do 3,5 (siła jonowa 10^{-2} M). Punkty przedstawiają wartości doświadczalne uzyskane z pomiarów ruchliwości elektroforetycznej, (○) monowarstwa zaadsorbowana w pH 7,4, pokrycie $2,1 \text{ mg m}^{-2}$, (▲) monowarstwa zaadsorbowana w pH 3,5, pokrycie $2,1 \text{ mg m}^{-2}$. Linia ciągła przedstawia interpolację wyników doświadczalnych.

Wartości pokrycia maksymalnego IgG wyniosły odpowiednio $2,1$ i $3,4 \text{ mg m}^{-2}$ w zależności od siły jonowej, sugerując tym samym mechanizm adsorpcji zgodnie, z którym, cząsteczki IgG adsorbują się w orientacji head-on. Dodatkowo stwierdzono, że adsorpcja HSA na monowarstwach IgG przy pH 7,4, jest nieznaczna i może być pominięta.

Uzyskane wyniki mają istotne znaczenie w obszarze stosowania testów immunologicznych, na którym są wykorzystywane tzw. immunolateksy.

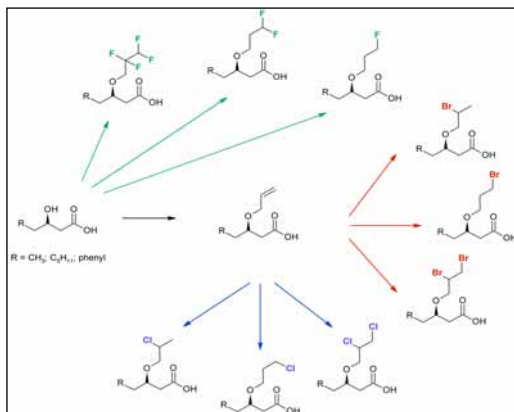
6. Biosynteza nowych estrów laktozy za pośrednictwem lipaz. Charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i przeciwrakowych.

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

(kierownik projektu: dr Maciej Guzik)

Etap 1: Przygotowanie prekursorów dla biokatalitycznej syntezy estrów

Etap ten obejmuje produkcję polimerów i monomerów pochodzenia bakteryjnego, a dokładnie: poli(hydroksyalkanianów) (PHA) oraz (R)-3-hydroksykwasów (3HA). Wyprodukowano minimalne ilości polimeru poli(hydroksynonanowego) (PHN) potrzebnego do badań wstępnych przy pomocy szczepu *Pseudomonas putida* KT2440, który poddano hydrolizie w środowisku kwasowym w celu otrzymania monomerów (3HA) (fermentacja kolbowa, fermentor w trakcie budowy). 3HA z PHN posłużyły do ustalenia warunków zabezpieczenia grupy hydroksylowej w pozycji 3C – schemat zabezpieczenia przedstawiony obok. Uzyskano wstępny protokół zabezpieczenia 3HA bromkiem allilowym oraz dalsze pochodne halogenowane.



Drugim aspektem Etapu 1 była produkcja aromatycznego PHA. We współpracy z Instytutem Farmakologii PAN wyprodukowano 5 g kwasu 9-fenylononanowego, który testowano na wybranym zestawie 20 bakterii producentów PHA w Irlandii. Szczep *Pseudomonas putida* CA-3 jako jedyny jest w stanie produkować fenyl-PHN jednak z bardzo niską konwersją (poniżej 0.1 Yx/s). Odstąpiono od fermentacji 9-fenylononanowego kwasu, który zastąpiono kwasem 5-fenylwalerianoiowym. W końcowym etapie uzyskano ok 3 g 3HA z tego polimeru (konwersja 0.5 Yx/s). Planowane są badania nad zabezpieczeniem grupy hydroksylowej dla tego związku.

Etap 2 – Badania przesiewowe lipaz

W celu zdobycia odpowiedniego warsztatu doktorant zaangażowany w realizację grantu, mgr Wojciech Snoch, odbył miesięczny staż w Instytucie Katalizy i Petrochemii CISC w Madrycie. Dokonano wstępnych badań przesiewowych pod kątem ustalenia najlepszego układu lipaza-rozpuszczalnik-substrat (przebadano 5 lipaz z dostępnej kolekcji 30; 2 rozpuszczalniki organiczne i dwie cieczy jonowe). Badania prowadzone były na laktozie oraz reprezentacyjnym estrze metylowym kw. nonanowego. W wyniku badań pokazano możliwość syntezy estru laktozy z kw. nonanowym z wydajnością ok 40% konwersji w przeciągu 24 h w cieczy jonowej (mrówczan choliny) z lipazą Amano. Inne układy badawcze nie dały pozytywnych rezultatów (brak produktu – estru cukrowego). Równoległe do powyższego opracowano metodę rozdziału produktów i substratów reakcji biokatalitycznej. Wykorzystano wysokosprawną chromatografię cieczową sprzężoną z detekcją mas.

7. Mechanizmy tworzenia i funkcjonalność multiwarstw nanocząstek zawierających biokompatybilne molekuly.

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

Określenie mechanizmów osadzania nanocząsteczek oraz adsorpcji makrocząsteczek na powierzchniach granicznych ciało stałe/ciecz ma istotne znaczenie dla wielu dyscyplin naukowych oraz zastosowań praktycznych. Pomimo, że otrzymywanie multiwarstw nanocząstek/biomolekuł na powierzchniach substratów jest przedmiotem intensywnych badań, mechanizmy ich tworzenia w dalszym ciągu stanowią wyzwanie dla naukowców.

Głównym celem realizowanego projektu badawczego jest wyjaśnienie mechanizmów tworzenia wielowarstwowych nanostruktur zbudowanych z bioaktywnych nanocząstek metali oraz makromolekuł przy użyciu metod pomiarowych działających w warunkach *in situ*, w szczególności metody potencjału przepływu.

Jako hipotezę badawczą przyjmuje się, że właściwości elektrokinetyczne nanocząstek/biomolekuł mają wpływ na otrzymywanie oraz stabilność multiwarstw, dlatego też szczególnie ważne jest określenie korelacji między właściwościami fizykochemicznymi wybranych cząstek/molekuł wchodzących w skład nanofilmów utworzonych w procesie samoorganizacji na wybranych powierzchniach adsorpcyjnych dla różnych sił jonowych i pH.

W roku 2016 zakres badań realizowanych w ramach niniejszego projektu obejmował dokładną charakterystykę objętościową makromolekuł: chlorowodoru polialliloaminy – PAH, poli-L-lizyny – PLL, oraz poli-L-argininy – PARG, jak również zoli srebra i hematytu. Pomiarów techniką dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz metodą mikroelektroforezy kapilarnej (LDV) wykonano dla szerokiego zakresu siły jonowej i pH elektrolitu NaCl oraz buforów: organicznego Tris oraz nieorganicznego PBS. Pomiarów pozwoliły na wyznaczenie współczynników dyfuzji makromolekuł/cząstek (średnic hydrodynamicznych) oraz określenie ich ruchliwości elektroforetycznej. Otrzymane wyniki pozwoliły na wyznaczenie właściwości elektrokinetycznych cząstek takich jak: punkt izoelektryczny, ilość ładunków nieskompensowanych oraz gęstość ładunku elektrokinetycznego, co umożliwiło określenie zakresu ich stabilności w danych warunkach pomiaru. Zrealizowane badania wykazały, iż makromolekuly wykazują dodatni ładunek powierzchniowy poniżej punktu izoelektrycznego $\text{pH} < 9,5$. Makromolekuly wykazywały największy potencjał zeta w zakresie pH 3,6-6,5 osiągając przykładowo dla siły jonowej $I=10^{-2}\text{M}$ NaCl potencjały: $\zeta_{\text{PAH}}=46$ mV, $\zeta_{\text{PLL}}=48$ mV, $\zeta_{\text{PARG}}=42$ mV oraz $I=0,15$ M NaCl, $\zeta_{\text{PAH}}=32$ mV, $\zeta_{\text{PLL}}=35$ mV, $\text{pH}=5,8$.

W okresie sprawozdawczym wykonano również szereg badań z użyciem metody potencjału przepływu mających na celu ilościową charakterystykę tworzenia oraz stabilności filmów polielektrolitowych w warunkach *in situ*. Wykazano, że badane makromolekuly charakteryzują się dobrą stabilnością, co umożliwia ich dalsze zastosowanie jako warstw prekursorowych zakotwicających dla budowania wielowarstwowych nanostruktur.

Wykonano również nowe naczynko pomiarowe przeznaczone do prowadzenia pomiarów metodą potencjału przepływu na powierzchniach płytek krzemowych. Otrzymane wyniki posłużą do określenia korelacji między właściwościami elektrokinetycznymi użytych do badań cząstek a stabilnością otrzymanych nanofilmów.

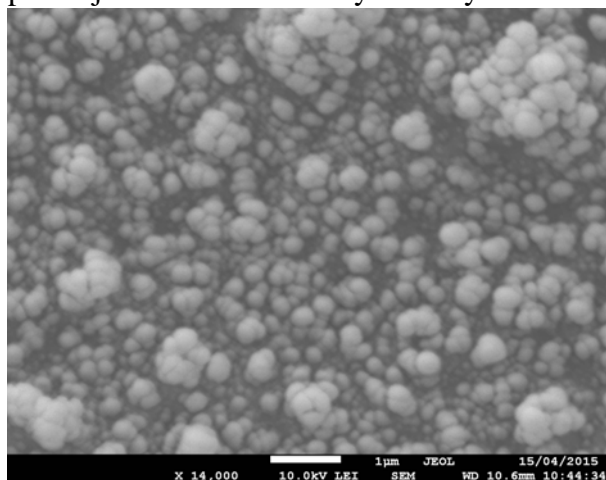
PROJEKTY BADAWCZE NCN "OPUS"

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

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

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Celem projektu było 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 – jodem dodekanianowym. Stwierdzono, że dodatkowa grupa CH₃ 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 są: określenie wpływu struktury surfaktantu i 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.

2. Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - 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 acireduktonu (ARD) – metaloenzymów szeroko rozpowszechnionych w przyrodzie i odpowiedzialnych za jeden z etapów recyklingu metioniny. Enzymy te wykazują unikalną zależność specyficzności reakcji katalitycznej oraz struktury od rodzaju metalu związanego w miejscu aktywnym.

Realizowane prace obejmują biosyntezę i oczyszczanie badanych enzymów, badania kinetyczne reakcji katalitycznej, krystalizację enzymów oraz modelowanie molekularne. 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 oraz tlenkiem azotu, wykrystalizowano i rozwiązano strukturę enzymu, oraz wykonano badania obliczeniowe nad mechanizmami reakcji enzymu ARD oraz dwóch syntetycznych kompleksów nieorganicznych, które katalizują reakcje modelowe dla ARD. Dodatkowo opracowano metodę syntezy stabilnej formy substratu dla enzymu ARD oraz przeprowadzono jego spektralną i strukturalną charakterystykę.

W roku 2016 przeprowadzono badania obliczeniowe z wykorzystaniem metody QM/MM (ONIOM) nad przebiegiem reakcji katalizowanej przez Fe-ARD oraz Ni-ARD. Uzyskane wyniki pozwoliły na postawienie hipotezy tłumaczącej różnicę w specyficzności reakcji w zależności od rodzaju metalu związanego w miejscu aktywnym.

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

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

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

Celem projektu było wyjaśnienie zależności pomiędzy właściwościami układu katalitycznego a jego działaniem w oparciu o reakcję syntezy eteru dimetylowego (DME) z mieszaniny H₂/CO₂. Prace w ramach projektu zakończono w styczniu 2016 roku.

Główne osiągnięcia naukowe projektu to:

1. Pokazano, jaki jest wpływ składu fazowego ZrO₂ odpowiedzialnego za rozproszenie miedzi, na wydajność do metanolu, a co za tym idzie, na wydajność do dwumetyloeteru DME. Badania przeprowadzone w trakcie realizacji projektu pokazały, że tetragonalna odmiana ZrO₂ wpływa korzystnie na tworzenie CH₃OH/DME.
2. Wyjaśniono mechanizm wpływu tetragonalnej odmiany ZrO₂. Pokazano, że w przypadku fazy tetragonalnej ZrO₂ powierzchniowe jony Cu⁺¹ są stabilizowane poprzez wakancje tlenowe. Pokazano, stosując obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT, że w przypadku tej fazy ZrO₂ układ Cu⁺¹ – wakancja tlenowa jest bardziej stabilny niż przypadku fazy jednoskośnej ZrO₂.
3. Pokazano, jaki jest wpływ promotorów metalicznych (Cr, Mn, Ga, Ag) na wydajność do DME dla składowej kwasowej montmorylonitu K10 impregnowanego zarówno HPMo, jak i HPW.
4. Udowodniony został niekorzystny pary wodnej na wydajność do DME.
5. Pokazane zostało, że metoda strącania z NaOH daje katalizatory, których powierzchnia właściwa BET oraz powierzchnia właściwa miedzi prowadzi do katalizatorów o największej wydajności DME. W przypadku składowych metalicznych wydajność do DME zależy w sposób złożony od obu tych powierzchni.
6. Badania kwasowości przy pomocy NH₃TPD oraz badana in situ IR pokazały, że duże stężenie centrów kwasowych o średniej mocy prowadzi do łatwiejszego odwodnienia metanolu i to heteropolikwas HPW jest czynnikiem, który to zapewnia.

Otrzymane w ramach realizacji projektu wyniki badań naukowych będą stanowić podstawę do uzyskania katalizatorów o wysokiej wydajności w wysokociśnieniowej reakcji syntezy eteru dimetylowego z mieszaniny H₂/CO₂.

4. 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 dotyczył otrzymywania i scharakteryzowania pod względem fizykochemicznym i katalitycznym nowych materiałów o hierarchicznej strukturze porowatej. Podstawowym celem poznawczym było 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 zastosowanie, jak to wykazały nasze badania, jako obiecujące katalizatory do procesów transformacji cząsteczek organicznych w fazie ciekłej.

Otrzymano serię materiałów warstwowych zawierających hierarchiczny system porów (mikropory i mezopory). Opracowano powtarzalną procedurę preparatyki zawiesin nanocząstek zeolitu (inaczej prekursorów zeolitu lub nanoklastery zeolitowych) o różnej zawartości glinu. Syntezy wykonano w niskiej temperaturze ($\leq 50\text{ }^{\circ}\text{C}$), a moduł krzemowy preparatów zmieniano w szerokich granicach ($\text{Si/Al} = 12 \div 70$). Otrzymane zawiesiny były stabilne w czasie (NMR, DLS) i monodispersyjne (około 5 nm). Po liofilizacji stałe preparaty były amorficzne (XRD). Wykazano, że nanoklastery powstają tylko po zastosowaniu podczas syntezy szablonu organicznego (TPAOH). Specyficzny charakter otrzymanych nanocząstek wykazano stosując metody TG i DSC. Nanoklastery posiadały częściowo uporządkowaną strukturę porowatą oraz obecność silnych centrów kwasowych w ilości proporcjonalnej do zawartości glinu. Wraz ze spadkiem ilości glinu w preparatach zachodził wzrost uporządkowania strukturalnego nanocząstek.

Stosując metodę magnetycznego rezonansu jądrowego wykonano szereg badań, wnoszących nowe spojrzenie na problem syntezy klastrów zeolitowych w niskich temperaturach (do $50\text{ }^{\circ}\text{C}$). Widma ^{29}Si MAS NMR zliofilizowanych zawiesin nanocząstek wykazały obecność sygnałów typowych dla struktur zeolitowych, czyli Si(0 do 2 Al) i Si(1 do 2 OH). W próbkach po syntezie i liofilizacji obecny był wyłącznie glin o koordynacji tetraedrycznej.

Otrzymane preparaty zawierające glin posiadały silną kwasowość protonową, porównywalną do kwasowości standardowych zeolitów. Pozwoliło to na zbadanie dwóch reakcji przebiegających na centrach kwasowych, czyli izomeryzacji aminalu oraz izomeryzacji α -pinenu. Oba procesy prowadzono w łagodnych warunkach, w niskich temperaturach i pod ciśnieniem atmosferycznym. Uzyskano bardzo dobre wyniki katalityczne. Porównanie konwersji α -pinenu na materiałach mezoporowatych ($\text{Si/Al} = 12$ i 40), z glinokrzemianem amorficznym (SA), standardowym zeolitem ZSM-5 (MFI) oraz tlenkiem glinu (Al_2O_3) wykazało, że transformacja α -pinenu na materiałach hierarchicznych przebiega znacznie szybciej. Wynika to z większej dostępności centrów aktywnych z uwagi na obecność mezoporów w badanych materiałach. Początkowa szybkość konwersji α -pinenu była funkcją ilości glinu w próbkach i wraz z nią rosła. Materiały mezoporowate w temperaturze $75\text{ }^{\circ}\text{C}$ wykazały początkową szybkość reakcji od $1,79$ do $4,83\text{ mmola } \alpha\text{-pinenu/g}_{\text{kat}} \times \text{min}$. Wartości te są porównywalne lub wyższe niż uzyskane na modyfikowanych katalizatorach feriierytowych w temperaturze $90\text{ }^{\circ}\text{C}$ [R. Rachwalik, Z. Olejniczak, J. Jiao, J. Huang, M. Hunger, B. Sulikowski, *J. Catal.* **252**, 161-170 (2007)].

W wyniku badań wykonanych m.in. w ramach powyższego projektu badawczego, jedna osoba uzyskała tytuł profesora nauk chemicznych, a cztery osoby ukończyły dysertacje doktorskie.

5. 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: suszarkę próżniową z oprzyrządowaniem (pompą próżniową, połączeniami wymaganymi przy stosowaniu próżni), biuretę do precyzyjnego dozowania wodoru, urządzenie do pobierania próbek

2. Synteza zmodyfikowanych nośników (zadanie zakończone):

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

3. Charakterystyka zmodyfikowanych nośników (zadanie 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 zakończone)

Badania katalityczne objęły optymalizację warunków uwodornienia 8 ketonów (acetofenonu, acetolu, ketonu etylowo-metylowego, ketonu cykloheksylo-metylowego, ketonu etylowo-fenylo-metylowego, metyloacetofenonu (grupa CH₃ w pozycji orto, meta i para).

6. Dynamika oscylacji w układzie pallad/wodór

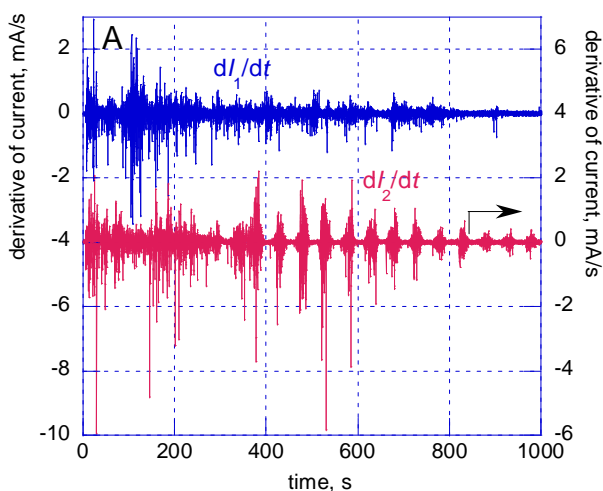
Projekt badawczy "Opus" NCN 2012/07/B/ST4/00518 [2013-2016]

(kierownik projektu: dr Erwin Lalik)

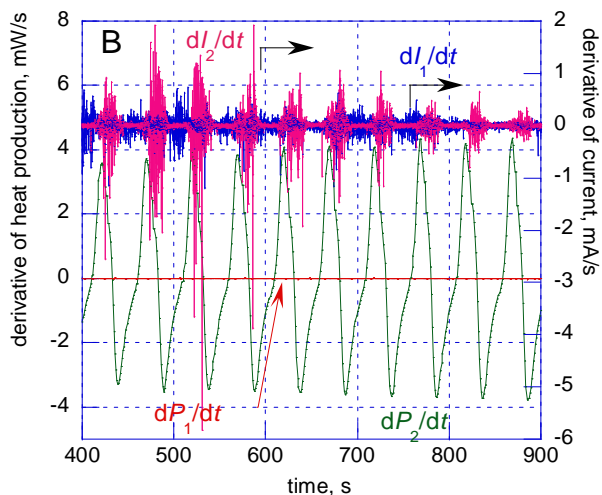
Połączenie metody mikrokalorymetrycznej i potencjostatycznej pozwoliło mierzyć jednocześnie prędkość wydzielania ciepła i natężenie prądu w próbce zawierającej proszek palladowy podczas oscylacji termokinetycznych towarzyszących sorpcji deuteru w tym metalu. Została w tym celu wykonana modyfikacja celki mikrokalorymetrycznej Microscal, tak by umożliwić wprowadzenie elektrod do próbki.

Zauważono, że oscylacyjnemu wydzielaniu ciepła podczas sorpcji deuteru lub wodoru w metalicznym palladzie towarzyszą chaotyczne fluktuacje natężenia prądu przepuszczanego przez metaliczny proszek Pd. Pomimo chaotycznego (deterministycznego) charakteru, fluktuacje prądowe wykazują pewien stopień korelacji z częstotliwością oscylacji termokinetycznych. Obliczenie pierwszej pochodnej dI/dt prądu pokazuje tę korelację z oscylacjami termokinetycznymi niedwuznacznie. Rysunek 1A porównuje obie pochodne dI_1/dt i dI_2/dt wyliczone dla nieoscylacyjnej i oscylującej sorpcji. Obie krzywe wykazują aperiodyczne fluktuacje o wysokiej częstotliwości (HF) wokół linii zerowej. Jednakże, jedynie krzywa dI_2/dt , odpowiadająca oscylacyjnej sorpcji, wykształca czasowo regularne własności, w wyraźnym przeciwieństwie do dI_1/dt , która jest całkowicie pozbawiona czasowej regularności. Krzywa może być opisana jako składająca się z periodycznie rozmieszczonych rozbłysków fluktuacji HF wokół linii zerowej, rozdzielonych przez okresy spokoju, chociaż przy pewnym poziomie szumu. Te spokojne okresy są wyraźnie nieobecne podczas nieoscylacyjnej sorpcji.

Różnica pomiędzy pochodnymi dI_1/dt i dI_2/dt została wyraźniej przedstawiona w powiększonym wykresie (400 - 900s) na Rysunku 1B, który pokazuje także odpowiednie fragmenty krzywych wydzielania ciepła $P_1(t)$ i $P_2(t)$. Wyraźnie, regularność czasowa krzywej dI_2/dt koreluje dokładnie z częstotliwością krzywej $P_2(t)$, tak, że sekwencja rozbłysków HF przedzielana spokojnymi okresami dopasowana jest odpowiednio do szczytów fal i dolin w oscylacjach termokinetycznych. W krzywej dI_1/dt , natomiast, wszelka regularność wydaje się być wykluczona przez brak periodyczności płaskiej krzywej $P_1(t)$ reprezentującej nieoscylacyjną sorpcję. Ten sam efekt został potwierdzony przez nie pojawianie się regularności w pochodnej prądowej dla procesu desorpcji (nie pokazana). Wydzielanie ciepła podczas desorpcji nie ma charakteru oscylacyjnego, ale fluktuacje oscylacji prądowych występują także i tutaj. Tak, więc, pojawienie się spokojnych okresów pomiędzy rozbłyskami HF w pochodnej dI_2/dt okazuje się związane wyłącznie ze zjawiskiem oscylacyjnego wydzielania ciepła.



Rysunek 1A



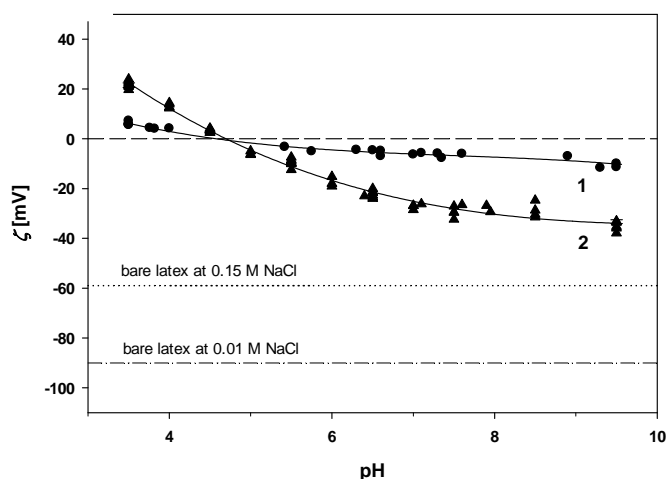
Rysunek 1B

7. 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 rozdzielania 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 mechanizmu adsorpcji immunoglobuliny G (IgG) na powierzchni mikrocząstek polimerowych (lateksów polistyrenowych) charakteryzujących się ujemnym ładunkiem powierzchniowym przy zastosowaniu metody dynamicznego rozpraszania światła (DLS), metody mikro-elektroforetycznej LDV oraz obrazowania przy pomocy mikroskopii sił atomowych (AFM). Przeprowadzono obszerne badania ruchliwości elektroforetycznej mikrocząstek polimerowych od stężenia IgG w roztworze dla różnych sił jonowych oraz pH 3.5. Na podstawie tych pomiarów wyznaczano potencjał zeta mikrocząstek przy użyciu modelu Henry'ego. Wskutek adsorpcji cząsteczek IgG ruchliwość elektroforetyczna wzrasta raptownie, co interpretowano w sposób ilościowy przy pomocy ogólnego modelu elektrokinetycznego. Wykazano, 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. Określono również stabilność monowarstw IgG na powierzchni nośników polimerowych oraz ich charakterystyki kwasowo-zasadowe dla szerokiego zakresu pH (Rysunek 1). 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 monowarstw IgG na mikrocząstkach od pH zmienianego cyklicznie między 3.5 a 9.5. Linia 1 przedstawia interpolację danych doświadczalnych dla siły jonowej 0.15 M, oraz pokrycia monowarstwy IgG wynoszącego 2 mg m⁻², a krzywa 2 przedstawia interpolację danych doświadczalnych dla siły jonowej 0.01 M oraz pokrycia monowarstwy 1.8 mg m⁻².

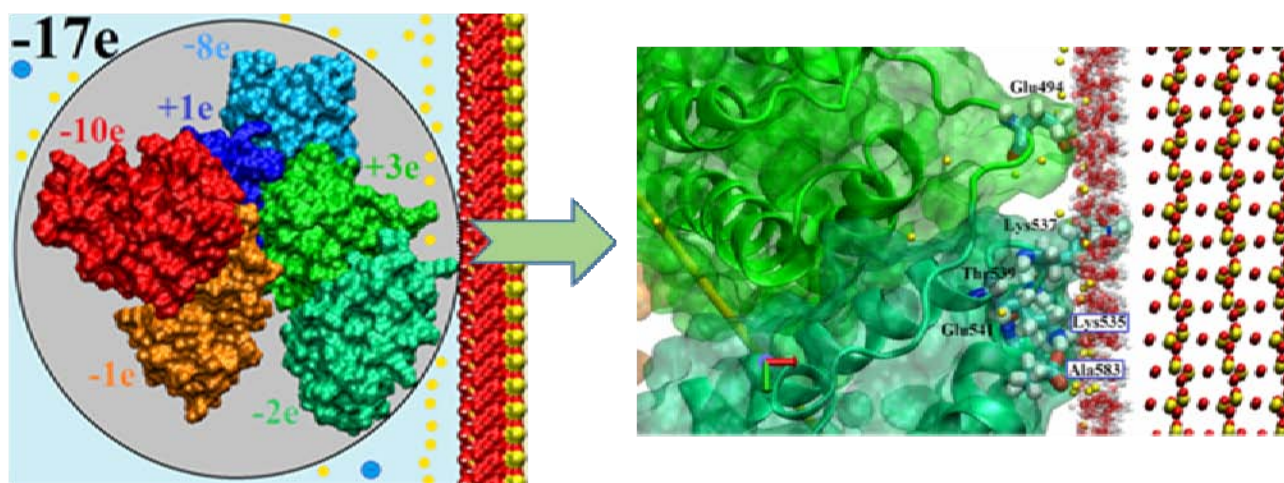
8. Struktura i właściwości warstw białkowych: od biomolekuły do funkcjonalnej warstwy (badania eksperymentalne i symulacje)

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

(kierownik projektu: dr hab. Barbara Jachimska)

W jaki sposób ujemnie naładowane białko spontanicznie adsorbują się na ujemnie naładowanej powierzchni? W ostatnich latach obserwuje się duże zainteresowanie zagadnieniem adsorpcji białek na powierzchni materiałów nieorganicznych, gdyż odgrywają istotną rolę w rozwoju nowych technologii takich jak: innowacyjne metody dostarczania leków, metody diagnostyczne czy tworzenie powłok antybakteryjnych.

Adsorpcję BSA na powierzchni krzemu monitorowano z zastosowaniem pełno atomistycznej dynamiki molekularnej (MD) uzupełnionej poprzez sterowaną dynamikę molekularną (SMD), oraz szereg metod eksperymentalnych takich jak dynamiczne rozpraszanie światła (DLS), ruchliwość elektroforetyczną, wieloparametrowy powierzchniowy rezonans plazmonów (MP-SPR) czy kąty zwilżania. Zastosowanie komplementarnych metod eksperymentalnych i teoretycznych prowadzi do szerszego zrozumienia zarówno mechanizmu adsorpcji BSA jak i określenia orientacji cząsteczki na powierzchni adsorpcyjnej. Bazując na wynikach MD możemy śledzić szczegóły procesu adsorpcji poprzez określenie reszt aminokwasowych decydujących o adsorpcji BSA na powierzchni SiO_2 , analizować siły napędowe oraz mechanizm mobilności BSA na powierzchni, natomiast symulacje SMD określają wysokość bariery energetycznej dla dyfuzji powierzchniowej czy desorpcji cząsteczki.



Rysunek 1. Wizualizacja procesu adsorpcji BSA na powierzchni SiO_2 z uwzględnieniem najważniejszych reszt aminokwasowych

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

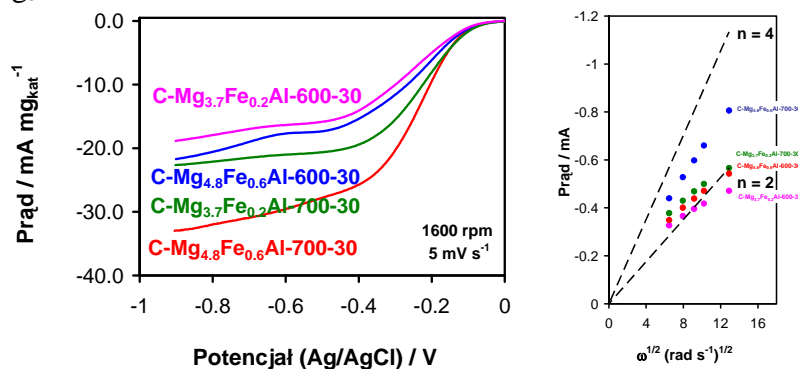
Projekt badawczy "Opus" NCN 2013/11/B/ST5/01417 [2014-2017]

(kierownik projektu: dr Aleksandra Pacuła)

Przygotowano kompozyty zawierające związki żelaza oraz domieszkowane azotem materiały węglowe o grafitopodobnej budowie i różnej morfologii ziaren (ziarna płytowe, ziarna rurkowe). Synteza próbek polegała na ogrzewaniu magnezowo-żelazowo-glinowych (MgFeAl) hydroksyazotanów o strukturze hydrotalkitu w temperaturze 600 lub 700 °C przez 30 lub 180 min. w przepływie argonu nasyconego parami acetonitrylu (CH₃CN) - źródło atomów węgla i azotu. Do syntezy wykorzystano hydroksysole o różnej zawartości jonów żelaza (Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al lub Mg_{3.7}Fe_{0.2}Al). Dla porównania przygotowano także kompozyty z udziałem magnezowo-glinowego (Mg₃Al) hydroksyazotanu. Wstępnie otrzymane kompozyty były traktowane kwasem (HCl:H₂O 2:1) w celu usunięcia nieorganicznych związków typu tlenów metali (Mg, Al lub Fe) i przeznaczone do dalszych badań. Otrzymane kompozyty oznaczono jako: C-Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al-600-30, C-Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al-700-30, C-Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al-600-180, C-Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al-700-180, C-Mg_{3.7}Fe_{0.2}Al-600-30, C-Mg_{3.7}Fe_{0.2}Al-700-30, C-Mg_{3.7}Fe_{0.2}Al-600-180, C-Mg_{3.7}Fe_{0.2}Al-700-180, C-Mg₃Al-700-30, C-Mg₃Al-700-180.

Właściwości fizykochemiczne preparatów scharakteryzowano za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD), analizy elementarnej, spektroskopii fotoelektronów (XPS), spektroskopii Ramana, spektroskopii Mössbauera, mikroskopii elektronowej (SEM i EDS). Aktywność elektrokatalityczną preparatów w reakcji redukcji tlenu sprawdzono za pomocą voltamperometrii cyklicznej. Pomiary dokonano w układzie trójelektrodowym, który stanowiły: wirująca elektroda z węgla szklanego, którego powierzchnia pokryta była badana próbka (elektroda robocza), drut platynowy (przeciwelektroda) i elektroda chlorosrebrowa (Ag/AgCl) (elektroda odniesienia). Eksperymenty przeprowadzono w temp. pokojowej (25 ± 1 °C) stosując jako elektrolit podstawowy wodny roztwór wodorotlenku potasu (0.1 M KOH).

Wszystkie kompozyty były aktywne w reakcji redukcji tlenu w roztworze alkalicznym. Bardziej aktywne okazały się kompozyty otrzymane w wyższej temperaturze (700 °C), w krótszym czasie (30 minut), z prekursora zawierającego więcej żelaza (Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al). W obecności kompozytów reakcja redukcji tlenu przebiega według ścieżki 2 i/lub 4 elektronowej. Oszacowana liczba elektronów biorących udział w reakcji wynosi 3 dla C-Mg_{4.8}Fe_{0.6}Al-700-30, C-Mg₃Al-700-30, C-Mg₃Al-700-180.



Ponadto, dwa kompozyty (C-Mg_{3.7}Fe_{0.2}Al-600-180 i C-Mg₃Al-700-180) zostały wykorzystane jako nośniki nanocząstek palladu (w ilości 20 % wag.) i będą dalej badane jako elektrokatalizatory w reakcji redukcji tlenu.

10. 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 określeniu wpływu temperatury kalcynacji na aktywność w reakcji całkowitego spalania toluenu katalizatorów otrzymanych z mikroemulsji 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 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 temperaturze 450 lub 600°C. Otrzymane materiały scharakteryzowano przy pomocy XRF, XRD, XPS, SEM, FTIR, H_2 TPR, i sorpcji N_2 w -196°C i przetestowano w reakcji katalitycznego spalania toluenu.

Wyniki testów katalitycznych wykazały, że układy otrzymane w środowisku wodnym charakteryzowały się wyższą aktywnością po kalcynacji w temperaturze 450°C niż 600°C, natomiast aktywność katalizatorów otrzymanych w środowisku organicznym rosła po kalcynacji w wyższej temperaturze. Ponadto, niezależnie od temperatury kalcynacji, kompozyty otrzymane w środowisku organicznym były bardziej aktywne niż ich odpowiedniki otrzymane w środowisku wodnym.

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

11. 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 PAN)

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

W ramach prac doświadczalnych opracowano metodę otrzymywania dwóch z trzech badanych białek, wykonano badania stabilności białek w różnych buforach, przetestowano bardzo wiele warunków krystalizacyjnych i w efekcie uzyskano pierwsze kryształy badanych białek, które poddano wstępnym badaniom dyfrakcyjnym. Potwierdzono również wstępnie aktywność katalityczną dla jednego z białek. W ramach badań obliczeniowych przeprowadzono dokowanie substratu do jednego z badanych białek oraz symulacje dynamiki molekularnej dla wymodelowanych kompleksów.

Wyznaczono warunki stabilności i krystalizacji dla dwóch białek. Wymodelowano strukturę kompleksu enzym-substraty.

Uzyskane wyniki powinny pozwolić na zoptymalizowanie i wyznaczenie struktury krystalicznej białka oraz przeprowadzenie badań obliczeniowych nad mechanizmem reakcji katalitycznej.

12. Teranostyczne nanonośniki do obrazowania MRI

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

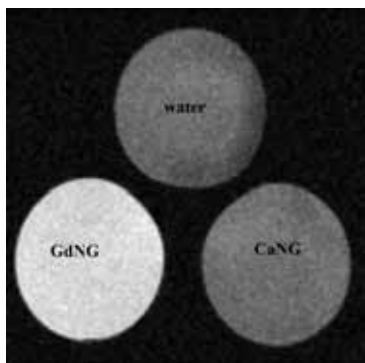
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Nanotechnologia jest interdyscyplinarną i multidyscyplinarną dziedziną nauki integrująca w sobie fizykę, chemię, inżynierię materiałową, biologię i medycynę. W szczególności, nanotechnologia oferuje wiele możliwości w dziedzinie biomedycznej, w tzw. "nanomedycynie". Nanomedycyna jest dziedziną badań o ogromnych oczekiwaniach dotyczących rozwoju spersonalizowanej medycyny w oparciu o zastosowanie nanocząstek w celach terapeutycznych czy diagnostycznych. Pomimo dużej uwagi poświęconej tworzeniu układów celowanego dostarczenia leków wciąż jednak pozostają wyzwaniem takie kwestie jak dostarczenie leków do konkretnych komórek, monitorowanie dostarczanego leku w czasie rzeczywistym oraz kontrola uwalniania leku w miejscu docelowym. Badania w zakresie nanomedycyny skupiają się na rozwiązywaniu tych zagadnień i już dostarczają potencjalnych rozwiązań odnośnie diagnostyki i leczenia np. chorób nowotworowych. Jednak wiele schorzeń wymaga inteligentnego podejścia – gdzie stosuje się terapię i diagnostykę jednocześnie, aby dobrać skuteczną dla danego pacjenta dawkę leku. Teranostyka – termin stanowiący kombinację słów terapia oraz diagnostyka – opisuje sposób postępowania, gdzie odpowiedni rodzaj terapii dobiera się na podstawie wyniku testu lub badania, czyniąc krok w kierunku medycyny personalizowanej. Dzięki materiałom i możliwościom, jakie dostarcza nam nanotechnologia, teranostyka umożliwiła jednoczesne dostarczenie leku oraz monitorowanie procesu leczenia w czasie rzeczywistym.

Większość związków używanych do obrazowania MRI opiera się na kompleksach gadolinu, nanocząstkach tlenku żelaza, złota lub kropek kwantowych i uzyskują funkcje terapeutyczną w połączeniu z lekami przeciwnowotworowymi. Główne wady tego rodzaju małych cząsteczek jest ich nie wystarczająco długi czas cyrkulacji w organizmie, ich cytotoksyczności, niekorzystnej biodystrybucji, itd. Z tego powodu niezwykle ważne jest zaangażowanie narzędzi nanotechnologii oraz opracowanie nowych strategii do jednoczesnego diagnozowania i terapii. Najbardziej obiecujące podejście opiera się wprowadzania związków pozwalających na obrazowanie (np. jonów gadolinu, nanocząstek tlenku żelaza) do polimerowych mikro- lub nanonośników naładowanych środkami terapeutycznymi.

Celem naukowym projektu jest zgromadzenie podstawowej wiedzy będącej u podstaw metod tworzenia nanonośników substancji leczniczych mogących pełnić również funkcje diagnostyczne tzw. nanonośników teranostycznych, w celu opracowania bezpiecznych i wydajnych nano-układów dla spersonalizowanej terapii.

W 2016 roku skupiono się na preparatyce nanożeli polimerowych jako nośników substancji aktywnych z możliwością jednoczesnej detekcji za pomocą MRI. Synteza hydrożeli oparta była na fizycznym sieciowaniu polimerów (algininy) za pomocą jonów wielowartościowych. Kapsułki nanożelowe uzyskano metodą emulsyfikacji. Technika ta oparta jest na wykorzystaniu odwróconej emulsji jako matrycy do tworzenia żelu. Wielkość uzyskanych nanożeli to $\sim 100\text{nm}$ o stężeniu 10^{10} cząstek/ml. Jony gadolinowe (jako kontrast MRI) użyto do sieciowania polimeru/tworzenia hydrożelu. Wytworzone nanożele enkapsulowano w wielowarstwowych powłokach przy użyciu biokompatybilnych polielektrolitów. Syntezowane żele wizualizowano za pomocą MRI oraz określono ich cytotoksyczność w testach MTT i LDH.



Zdjęcie MRI z protokołu T1 FLASH zawiesiny nanożeli GdNG, CaNG i wody

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

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

(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)

Centra aktywne w zeolitach są zlokalizowane w mikroporach, z czym wiążą się takie zalety jak obecność bardzo silnych centrów kwasowych, stabilizacja karbokationu przez ujemny ładunek sieci oraz kształtoselektywność. Wadą zeolitów jest jednak wolna dyfuzja reagentów w tych wąskich kanałach, co można usunąć przez zastosowanie zeolitów hierarchicznych posiadających dodatkowy system mezoporów. Najprostszą i najtańszą metodą otrzymywania zeolitów hierarchicznych jest desilikacja z użyciem roztworów zasad. Większość dotychczasowych prac w tym zakresie dotyczyła desilikacji zeolitów wysokokrzemowych (np. ZSM-5). Przedstawiane wyniki badań odnoszą się natomiast do procesu desilikacji zeolitu Y o module krzemowym Si/Al = 31, otrzymanego przez dealuminację komercyjnego zeolitu Y. Zmiennymi parametrami przeprowadzonej modyfikacji były: rodzaj zastosowanej zasady (NaOH, NH₃.aq, TBAOH - wodorotlenek tetrabutylamonowy oraz mieszanina NaOH/TBAOH o różnym stosunku molowym), temperatura procesu oraz warunki traktowania zeolitu po desilikacji.

Status Si i Al został określony na drodze pomiarów MAS NMR oraz XPS. Porowatość materiałów przebadano przy użyciu niskotemperaturowej adsorpcji N₂, a kwasowość - ilościowych pomiarów IR. Naturę centrów Lewisa zdefiniowano stosując niskotemperaturową sorpcję CO. Badano także moc kwasową i heterogeniczność zeolitycznych grup Si-OH-Al. Wpływ desilikacji na właściwości katalityczne odniesiono do reakcji izomeryzacji α -pinenu. Grupy Si-OH₁-Al w wyjściowym zeolicie były homogeniczne i bardzo silnie kwasowe. Były one silniej kwasowe niż w większości innych, silnie kwasowych zeolitów (np. ZSM-5, mordenit). Działanie rozcieńczonego NaOH w temperaturze pokojowej prowadzi do usunięcia ok. 80% Si, amorfizacji zeolitu oraz utraty kwasowych Si-OH-Al. Z kolei, amoniak ekstrahuje bardzo małe ilości Si i również prowadzi do amorfizacji. TBAOH umożliwia usunięcie bardzo małych ilości Si przy zachowaniu struktury zeolitu. Struktura zeolitu jest także zachowana po działaniu mieszaniny NaOH/TBAOH, która umożliwia ekstrakcję ok. 40% Si. Działanie NaOH/TBAOH powoduje otrzymanie zeolitu o dobrej krystaliczności, jak również wysokim stężeniu i mocy kwasowej Si-OH-Al. Zachowana jest przy tym mikroporowatość, lecz powstają mezopory o znacznej objętości i powierzchni (0.90 cm³/g i 450 m²/g). Średnia średnica mezoporów wynosi ok. 4-5 nm i jest mniejsza niż dla desilikowanego ZSM-5. Najlepszą porowatość otrzymuje się dla mieszaniny desilikującej zawierającej 10 mol% TBAOH. Jest to także wariant najtańszy, bowiem TBAOH jest odczynnikiem droгим. Wzrost temperatury desilikacji do 65°C nie zmienia wyraźnie ani kwasowości ani porowatości.

Zeolity desilikowane mieszaniną NaOH/TBAOH wykazały bardzo wysoką aktywność katalityczną w izomeryzacji α -pinenu, która była znacznie wyższa niż wyjściowego desilikowanego FAU-31 czy ZSM-5. Obserwowany wynik przypisano koincydencji dwóch zalet: wysokiej mezoporowatości oraz bardzo dużej kwasowości.

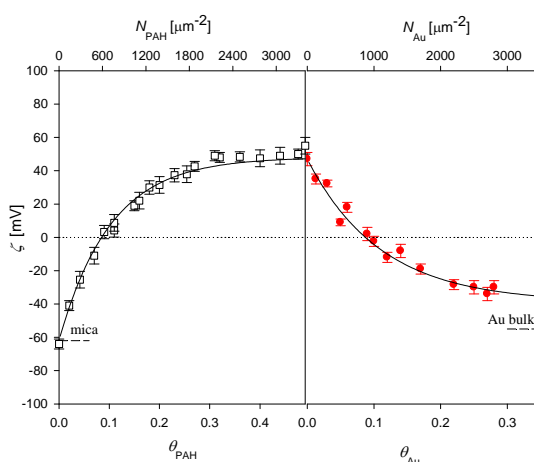
Spodziewamy się zaproponować ogólną procedurę otrzymywania aktywnych katalizatorów o bardzo wysokiej kwasowości, dobrej dostępności centrów aktywnych oraz o nienaruszonej strukturze materiału porowatego w wyniku jego łagodnej desilikacji, poprzedzonej dealuminacją (wyjściowe materiały o wysokim module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

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

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

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

W ramach przeprowadzonych prac określono mechanizmy osadzania nanocząstek złota na powierzchni sensorów krzemionkowych oraz płytek miki modyfikowanych przez kontrolowaną adsorpcję polielektrolitu kationowego: chlorowodoru poli (allilo aminy) (PAH). Zastosowano szereg bezpośrednich technik pomiarowych, min. metodę mikrowagi kwarcowej (QCM), skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), mikroskopii sił atomowych (AFM) oraz elektrokinetyczną metodę potencjału przepływu. W sposób systematyczny zbadano wpływ stężenia objętościowego suspensji, siły jonowej roztworu oraz pH środowiska na kinetykę osadzania nanocząstek. Wykazano, że osadzanie nanocząstek przebiegało według mechanizmu nieodwracalnej adsorpcji, co umożliwiło precyzyjnie wyznaczyć pokrycia maksymalne tworzonych monowarstw, które wzrastały systematycznie wraz ze wzrostem siły jonowej. Efekt ten interpretowano przy pomocy hybrydowego modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji przy uwzględnieniu oddziaływań elektrostatycznych. Wyniki pomiarów QCM zostały wykorzystane jako układ odniesienia do interpretacji wyników uzyskanych w pomiarach potencjału przepływu. Ponadto, pomiary te kalibrowano przez bezpośrednie wyznaczenie pokrycia nanocząstek przy pomocy obrazowania SEM i AFM. Umożliwiło to ilościową interpretację zależności potencjału zeta monowarstwy nanocząstek od pokrycia przy pomocy ogólnego modelu elektrokinetycznego bez użycia parametrów dopasowywalnych (linia ciągła na Rys. 1). W ten sposób uzyskano jednoznaczność funkcjonalną umożliwiającą wyznaczenie pokrycia nanocząstek na powierzchniach stałych w warunkach *in situ*. Ponadto, przy użyciu metody potencjału przepływu dokonano obszernej charakterystyki kwasowo-zasadowej monowarstw nanocząstek oraz ich stabilności dla szerokiego zakresu pH i siły jonowej. Wykazano, że uzyskane wyniki doświadczalne i teoretyczne pozwalają na opracowanie precyzyjnej i powtarzalnej metody wytwarzania monowarstw nanocząstek złota o kontrolowanym stopniu pokrycia i strukturze. Monowarstwy te mogą być wykorzystane jako efektywne substraty (sensory) do kontrolowanej adsorpcji białek.



Rysunek 1. Zależność potencjału zeta monowarstwy PAH na micy od pokrycia nanocząstek złota uzyskana w pomiarach potencjału przepływu (pH 5.7, 1×10^{-2} M NaCl) (prawa część rysunku). Lewa część rysunku przedstawia wyniki uzyskane dla PAH. Linie ciągłe przedstawiają wyniki teoretyczne obliczone przy użyciu ogólnego modelu elektrokinetycznego.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "PRELUDIUM"

1. 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)

Zrealizowano wszystkie zadania zawarte w planie grantu. Tym samym osiągnięto główny jego cel: opisano na poziomie molekularnym czynniki elektronowe istotne dla aktywności katalitycznej centrum kobaltowego w różnych otoczeniach atomowych. Wykonane badania stanowiły wyzwanie postawione projektowi ze względu na skomplikowaną strukturę elektronową badanych układów – zawierających tylko jedną cząsteczkę NO i tych modyfikowanych przez koadsorpcję ligandów NH₃. Miejsca aktywne były reprezentowane przez niewielkie modele zbudowane w oparciu o pojedynczy tetraedr glinowy. Ich weryfikację przeprowadzono za pomocą rozszerzonych klastrów będących wycinkiem sieci chabazytu. Pomocne okazało się również porównanie rozważanych geometrii ze strukturami periodycznymi. W rezultacie przeprowadzonych obliczeń uzyskano rozkład gęstości elektronowej powstały na skutek oddziaływania NO z kobaltem, utożsamiając formę liganda z NO⁻, NO⁺ lub NO⁰. Dyskusja znaczenia poszczególnych struktur rezonansowych Co^{III}NO⁻, Co^INO⁺, Co^{II}NO⁰ doprowadziła do spójnego obrazu pozwalającego zrozumieć przyczynę aktywacji/dezaktywacji NO dla wszystkich badanych układów. Interpretacja przepływów ładunku mających miejsce podczas tworzenia wiązania Co(II)-NO miała charakter porównawczy. W omawianym przypadku była ona czytelna tylko dla centrum Co(II) zawierającego trzy ligandy NH₃ i kompleksu niezwiązanego kowalencyjnie z sieciowymi atomami tlenu, posiadającego pięć cząsteczek NH₃ (obydwa układy znajdowały się w stanie singletowym, drugi z nich wykazuje mniejszą zdolność do aktywacji NO). Stosując technikę opartą na analizie transferów gęstości elektronowej z powodzeniem opisano wpływ molekuł NH₃ na efektywność procesów donacji (przekazanie gęstości elektronowej z NO na kation Co²⁺) i donacji zwrotnej (przekazanie gęstości elektronowej z kationu Co²⁺ na NO). Wskazano na istotną rolę stanu spinowego w procesie osłabienia wiązania N-O. Zaobserwowano, że może on decydować o kierunku przekazania gęstości elektronowej. Stwierdzono wspomagającą rolę sieci w procesie aktywacji NO na bazie obliczeń dla wybranych klastrów stanowiących wycinek sieci chabazytu i ferierytu. Kolejnym osiągnięciem było dokonanie reinterpretacji doświadczalnego widma IR na podstawie obliczeń DFT dla małych modeli. Współpraca teorii i eksperymentu umożliwiła identyfikację różnych form centrum aktywnego Co(II) mogących w rzeczywistości współistnieć. Ich obecność jest uzależniona m.in. od struktury zeolitu, warunków prowadzenia syntezy. W badaniach prowadzących do ustalenia stanu o najniższej energii posłużono się zaawansowanymi metodami chemii kwantowej. Wykonano prace wpisuje się więc w dyskusję na temat efektywności i stosowalności poszczególnych metod teoretycznych.

2. Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchniach nośników koloidalnych

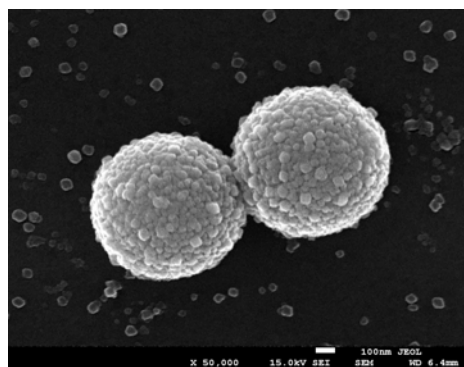
Projekt badawczy "Preludium" NCN 2013/11/N/ST4/00981 [2014-2016]
(doktorant: mgr Marta Sadowska, promotor: prof. Zbigniew Adamczyk).

Głównym celem projektu było rozwinięcie ilościowego opisu oraz określenie mechanizmów osadzania nanocząstek na powierzchniach nośników w postaci suspensji koloidalnych. Pierwszym etapem badań była synteza i obszerna charakterystyka nanocząstek hematytu o różnych średnicach hydrodynamicznych, następnie charakterystyka fizykochemiczna mikrosfer polistyrenowych. Następnie przeprowadzono pomiary ruchliwości elektroforetycznej mikrosfer polistyrenowych pokrytych nanocząstkami. Ostatnim etapem było określenie pokrycia maksymalnego nanocząstek hematytu (o dwóch różnych rozmiarach) na powierzchni mikrocząstek polistyrenowych, określenie granic stosowalności modelu elektrokinetycznego 3D..

Pokrycie maksymalne monowarstw nanocząstek hematytu na powierzchni mikrosfer polistyrenowych zostało określone na podstawie pomiarów ruchliwości elektroforetycznej oraz obliczeń teoretycznych (Tabela 1).

Tabela 1. Zdjęcie SEM nanocząstek hematytu osadzonych na mikrocząstkach koloidalnych oraz pokrycie maksymalne nanocząstek hematytu na mikrocząstkach.

	I [M]	$\kappa d_H/2$	Pokrycie maksymalne nanocząstek hematytu na mikrocząstkach polistyrenowych	
			Metoda elektroforetyczna	Obliczenia teoretyczne
HE29				
	10^{-4}	0,5	$0,30 \pm 0,10$	model RSA nie stosuje się
	10^{-3}	1,5	$0,30 \pm 0,10$	0,15
	10^{-2}	4,8	$0,40 \pm 0,10$	0,31
HE86				
	10^{-4}	1,4	$0,30 \pm 0,10$	0,19
	10^{-3}	4,6	$0,35 \pm 0,10$	0,31
	10^{-2}	14	$0,50 \pm 0,10$	0,50



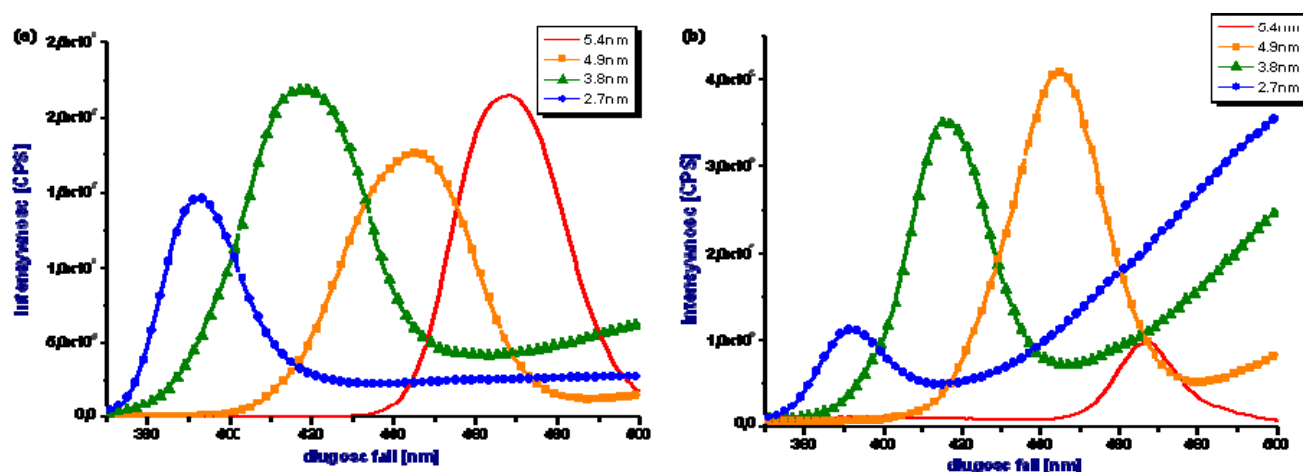
Z przeprowadzonych pomiarów wynika, że wraz ze wzrostem siły jonowej następuje systematyczny wzrost pokrycia mikrosfer nanocząstkami hematytu. Jest to spowodowane zmniejszeniem zasięgu elektrostatycznych sił odpychających między nanocząstkami. Zaobserwowano również, że niskich sił jonowych pokrycia maksymalne są znacznie większe, niż przewidziane z modelu teoretycznego RSA, co interpretowano dodatkowym ekranowaniem ładunku nanocząstek przez ujemnie naładowane łańcuchy polimerowe. Istotną część stanowiło określenie granic stosowalności trójwymiarowego modelu elektrokinetycznego 3D, rozwiniętego dla powierzchni płaskich. W wyniku przeprowadzonych badań potwierdzono, że model 3D stosuje się z dobrym przybliżeniem do powierzchni sferycznych. Przeprowadzone w ramach tej projektu, pomiary mają istotne znaczenie poznawcze z możliwością wykorzystania ich do ilościowej interpretacji adsorpcji białek na nośnikach koloidalnych. Badania te mają również znaczenie praktyczne dla efektywnego prowadzenia testów immunologicznych, czy reakcji enzymatycznych w bioreaktorach, gdyż nośnikiem szeroko używanym w diagnostyce medycznej są mikrosfery polistyrenowe pokryte warstewkami cząsteczek białek.

3. Filmy polielektrolitowo-lipidowe z wbudowanymi hydrofobowymi nanocząstkami

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

Głównym celem projektu jest opracowanie mechanizmu otrzymywania filmów polielektrolitowo-lipidowych z wbudowanymi hydrofobowymi nanoobjektami w celu uzyskania struktur o zaplanowanej funkcjonalności. Zgromadzone wyniki będą mieć zasadniczy wpływ na poszerzenie wiedzy w ramach tego zagadnienia.

W tegorocznych pracach badawczych zoptymalizowano warunki tworzenia liposomów, jako nośników hydrofobowych kropek kwantowych wykonanych z siarczku kadmu. Do otrzymywania liposomów z zamkniętymi kropkami kwantowymi zastosowano metodę hydratacji cienkiego filmu lipidowego, a w celu ujednoczenia rozmiarów pęcherzyków lipidowych wykorzystano, jako metodę kalibracyjną znacznie bardziej zaawansowaną metodę ekstruzji, przeciskanie przez membrany poliwęglanowe o ściśle określonych rozmiarach porów (200nm i 100nm). Do preparatyki liposomów użyto mieszaniny syntetycznych lipidów POPC:POPE o stosunku wagowym 1:1. Kropki kwantowe wbudowywano w hydrofobowe części liposomów. Używano serie kropek kwantowych o rozmiarach od 2.7nm do 5.4nm. Każdy rodzaj kropek kwantowych udało się wbudować w badane układy lipidowe. Zostało to udowodnione poprzez widma emisji, wykonane przy użyciu spektrofлуorymetru dla liposomów z kropkami kwantowymi. Obserwowano charakterystyczne piki, odpowiadające zastosowanym kropkom kwantowym (Rysunek. 1(a),(b)). Rutynowo zbadano rozmiar i potencjał zeta wytwarzanych zmodyfikowanych liposomów. Dodatkowo, wykonane zdjęcia cryo-TEM potwierdziły obecność nanocząstek w części hydrofobowej liposomów.



Rysunek 1. Fluorescencyjne widma emisyjne kropek kwantowych (a) w toluenie oraz (b) w pęcherzykach lipidowych.

PROJEKTY BADAWCZE NCN "FUGA"

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

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

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

W ramach realizacji projektu, z wykorzystaniem oprogramowania TRIDYN wykonane zostały symulacje rozkładu atomów w nanostrukturach kobaltu naświetlonych jonami Ga^+ . Symulacje przeprowadzono dla nanostruktur kobaltu znajdujących się w różnym otoczeniu, tj. dla różnej kombinacji warstwy buforowej i warstwy przykrywającej – platyny lub/i złota. Symulacje pozwoliły: (i) prześledzić zmiany profili rozkładu atomów, wywołane w naświetlonych nanostrukturach różnymi wartościami dozy jonów, (ii) prześledzić proces mieszania się warstw podczas naświetlania, (iii) zoptymalizować grubość warstwy przykrywającej (Pt lub Au) tak, aby możliwa była penetracja bombardujących jonów Ga do warstwy Co, (iv) określić dozy naświetlania jonami Ga^+ w eksperymencie rzeczywistym, (v) określić efektywność trawienia nanostruktury podczas naświetlania. Technika epitaksjalnego nanoszenia z wiązki molekularnej wykonane zostały cztery różne rodzaje nanostruktur: $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Co}/\text{Pt}$, $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Co}/\text{Au}$, $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Au}/\text{Co}/\text{Pt}$, $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Pt}/\text{Au}/\text{Co}/\text{Au}$. Dodatkowo warstwa kobaltu wytworzona została w dwóch różnych postaciach - warstwa z gradientem grubości $d_{\text{Co}}=0-5$ nm oraz jako płaska warstwa o grubości $d_{\text{Co}}=3$ nm. Nanostruktury naświetlone zostały różnymi dozami jonów Ga^+ o energii 30 keV, przy czym stosowano albo gradient dozy lub wybrane stałe wartości dozy. Wstępne pomiary technikami magnetoptycznymi naświetlonych nanostruktur z gradientem grubości kobaltu wykazały istotny wpływ na właściwości magnetyczne warstwy buforowej i przykrywającej. W zależności od rodzaju przykrycia i bufora w funkcji grubości warstwy kobaltu i wielkości dozy naświetlania, zaobserwowano: (i) dwa obszary z prostopadłą anizotropią magnetyczną (**PMA**) dla Pt/Co/Pt, (ii) jeden obszar z PMA dla Pt/Co/Au, (iii) jeden obszar z **PMA** dla Au/Co/Pt, ale przy innych wartościach zarówno grubości warstwy i dozy naświetlania w porównaniu do Pt/Co/Au, (iv) dwa obszary o zwiększonej wartości anizotropii, ale bez **PMA**, dla Au/Co/Au. Obserwowane zmiany najprawdopodobniej związane są z tworzeniem się różnych np. stopów czy naprężeń na interfejsach warstwy kobaltu i platyny lub kobaltu i złota, posiadających odmienne właściwości. Wykonane symulacje nie są w stanie dać jednoznacznej odpowiedzi co do obecności stopów, dlatego też wykonane zostały pomiary z wykorzystaniem rentgenowskiej spektroskopii fotoelektronów. W otrzymanych widmach widoczne są różnice pomiędzy poszczególnymi nanostrukturami, jednak potrzebna jest szczegółowa ilościowa analiza zmierzonych widm (w toku). Oprócz wspomnianych powyżej badań prowadzone również były prace nad implementacją i testowaniem mikroskopu PEEM oraz XAS w synchrotronie Solaris.

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

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

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

Oddziaływania białek z powierzchniami stałymi mają istotne znaczenie z punktu widzenia biologicznych funkcji białek (np. w procesie adhezji komórek) lub zastosowań bio-inżynierskich (np. dla kompatybilności implantów). Zdolność kontroli procesu adsorpcji białek jest w związku z tym sposobem modelowania procesów biologicznych i bio-inspirowanych aplikacji. Niedawne doniesienia naukowe pokazały, że promieniowanie elektromagnetyczne w zakresie podczerwieni (IR) wpływa na poziom uwodnienia powierzchni hydrofilowych, włączając w to powierzchnie biomakrocząsteczek. Tendencja substancji rozpuszczonych (w tym białek) do adsorpcji na granicy faz zależy od względnego balansu między powinowactwem białka do rozpuszczalnika (hydratacji) a jego powinowactwem do powierzchni (dyktowanym specyficznymi oddziaływaniami lub niespecyficzną adsorpcją hydrofobową). Adsorpcja na powierzchni wiąże się również z (przynajmniej częściową) dehydratacją białka i/lub powierzchni. Celem tego projektu jest zbadanie możliwości modelowania oddziaływań białek z powierzchniami stałymi za pomocą czynnika fizycznego – promieniowania podczerwonego – poprzez wpływ IR na hydratację białka i powierzchni..

Pierwszym krokiem na drodze do zrozumienia oddziaływań białek z powierzchniami stałymi przy udziale promieniowania elektromagnetycznego było zbadanie oddziaływania białek z nanocząstkami krzemionki. Adsorpcja białek na powierzchni nanoobjektów definiuje właściwości zarówno nano-nośnika jak i zaadsorbowanego białka. Przeprowadzone badania pokazały, że IR promuje hydratację polarnych regionów biomakrocząsteczek i zmniejszenie powinowactwa do wody regionów niepolarnych. Ma to istotne znaczenie dla krótkodystansowych (opartych na oddziaływaniach hydrofobowych) i długodystansowych (opartych na oddziaływaniach momentów dipolowych) oddziaływań między cząsteczkami białka. Dzięki tym efektom możliwe było modulowanie za pomocą IR oddziaływań (upakowania w osadzie – siły hydrofobowe oraz asocjacji w roztworze – oddziaływania elektrostatyczne) nanocząstek krzemionki pokrytych zaadsorbowaną warstwą białek. Agregacja nanocząstek w roztworze może mieć istotne znaczenie dla ich interakcji z systemami biologicznymi, ponieważ wielkość nanocząstek decyduje o ich zdolności do pokonywania barier biologicznych (np. przenikania wewnątrz komórek). Poza tym wykazano, że woda hydratacyjna białek i jej organizacja na poziomie molekularnym są niezbędne do prawidłowego wypełniania funkcji biologicznych. Istotne jest zarówno uwodnienie powierzchni makrocząsteczki (promowane przez IR) zapewniające białku m.in. odpowiednią funkcjonalną plastyczność i kompatybilność ze środowiskiem wodnym, jak i zdolność do dehydratacji niepolarnych regionów (również wspomagane przez IR) niezbędna do prawidłowego zwijania białek w roztworze i tworzenia hydrofobowego centrum.

Otrzymane wyniki sugerują zatem, że promieniowanie podczerwone może być zbadane pod kątem jego wykorzystania do modulowania bio-inspirowanych procesów. Poza znaczeniem biologicznym i aplikacyjnym, wpływ promieniowania podczerwonego może być rozważony jako potencjalnie istotny czynnik definiujący oddziaływanie biopolimerów ze środowiskiem naturalnym (w glebie lub w wodach powierzchniowych) i procesu ich remediacji.

PROJEKTY BADAWCZE MNiSW "IUVENTUS PLUS"

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

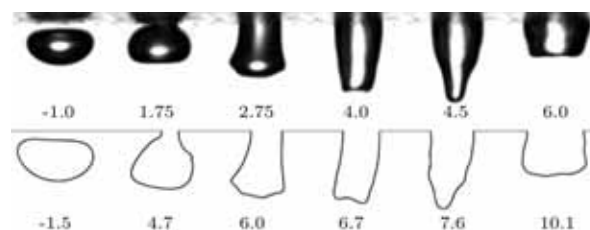
Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2014 053973 [2013-2016]

(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 umożliwił 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 przeprowadzono obliczenia numeryczne, mające na celu określenie zmian stopnia unieruchomienia granicy międzyfazowej ciecz/ciało stałe na kinetykę zderzeń pęcherzyka gazu i utworzenia kontakty trójfazowego (ang. three-phase contact - TPC). Powierzchnia ciecz/ciało stałe była gładką powierzchnią hydrofobową, rekonstruowaną z elementów, dla których przyjęte zostały różne hydrodynamiczne warunki brzegowe. Sytuacja ta miała w prosty sposób odwzorowywać postulowaną w literaturze sytuację, w której podczas zanurzania powierzchni hydrofobowej w fazie wodnej, powietrze uwięzione zostaje pod powierzchnią stałą w postaci submikronowych pęcherzyków gazu. W zależności od szorstkości powierzchni ciała stałego ilość oraz rozmieszczenie mikro- oraz nano-pęcherzyków powietrza może się znacząco różnić. Ponadto, powierzchnia submikronowych pęcherzyków w czystej wodzie jest całkowicie ruchliwa, co może zmienić globalne hydrodynamiczne warunki brzegowe całej powierzchni ciecz/gaz, prowadząc do znacznych różnic w kinetyce TPC tworzonego przez uderzający makropęcherzyk. Otrzymane dane z obliczeń numerycznych porównano z wynikami odpowiednich eksperymentów, wykonywanych wcześniej w naszym laboratorium.

Wykazano, że czas utworzenia kontaktu trójfazowego, kinetyka rozszerzania się perymetru zwilżania oraz spektakularne kształty pęcherzyków podczas rozerwania ciekłego filmu i rozszerzania się kontaktu trójfazowego (patrz Rysunek 1) zależą ściśle od rozmieszczenia obszarów o różnych właściwościach hydrodynamicznych na powierzchni ciecz/ciało stałe. Dobra zgodność wyników obliczeń i danych eksperymentalnych wzmocniła słuszność hipotezy postulującej decydujący wpływ powietrza uwięzionego pod hydrofobową powierzchnią ciecz/ciało stałe na kinetykę utworzenia oraz rozchodzenia się linii trójfazowego kontaktu (perymetru zwilżania). Kolejny etap rozpoczętych obliczeń obejmować będzie określenie wpływu ruchliwości powierzchni ciecz/gaz (powierzchni pęcherzyka) na kinetykę utworzenia TPC, tj. modelowana będzie sytuacja zderzeń pęcherzyka gazu z powierzchnią hydrofobowego ciała stałego w roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych, na której obecność powietrza symulowana jest w sposób bezpośredni.



Rysunek 1. Kształty pęcherzyka podczas zderzenia i tworzenia TPC dla powierzchni hydrofobowej: górna sekwencja - eksperyment, powierzchnia o średniej szorstkości, dolna sekwencja - symulacje numeryczne

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

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

(kierownik projektu: dr Magdalena Oćwieja)

Szereg najnowszych doniesień literaturowych wskazuje, że mechanizmy aktywności biologicznej nanocząstek srebra są ściśle związane z uwalnianiem z ich powierzchni srebra jonowego. Z drugiej zaś strony wiadomo, że aktywność srebra koloidalnego bezpośrednio bądź pośrednio modelują również molekuly stabilizatorów zaadsorbowane na ich powierzchni, które w zależności od struktury i właściwości mogą maskować lub wzmacniać działanie nanocząstek w porównaniu do srebra jonowego o tym samym stężeniu. W celu pełnego poznania mechanizmów aktywności biologicznej srebra koloidalnego konieczne jest więc określenie wpływu ładunku powierzchniowego, struktury chemicznej warstwy stabilizującej, a także stopnia utlenienia nanocząstek na procesy ich wychwytu, akumulacji lub biodegradacji w komórkach zarówno prokariotycznych jak i eukariotycznych. Mając na uwadze potencjalne zastosowanie nanocząstek srebra w medycynie, istotne jest określenie wpływu ich właściwości powierzchniowych na aktywność cytotoksyczną wobec komórek ludzkiego układu immunologicznego oraz komórek tkanki łącznej właściwej, co jest głównym zadaniem niniejszego projektu.

W 2016 roku, celem realizowanych badań było opracowanie metod syntezy nanocząstek srebra charakteryzujących się zbliżonym rozkładem wielkości lecz zróżnicowanych pod względem właściwości powierzchniowych. Procesy otrzymywania wodnych suspensji nanocząstek srebra oparto o metodę redukcji chemicznej jonów srebra dostarczonych w postaci dobrze rozpuszczalnej soli nieorganicznej za pomocą borowodoru sodu. Powierzchnię tak wytworzonych nanocząstek srebra modyfikowano następnie za pomocą cytrynianu trisodu lub chlorowodoru 2-aminotioetanolu prowadząc reakcje wymiany liganda.

Morfologię oraz rozkład wielkości nanocząstek wyznaczano na podstawie zdjęć uzyskanych za pomocą transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM) zaś stabilność suspensji, w kontrolowanych warunkach pH oraz sił jonowych, badano za pomocą techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS). Pomiaru ruchliwości elektroforetycznej nanocząstek pozwoliły na określenie ich właściwości powierzchniowych (potencjał zeta, gęstość ładunku, liczba ładunków nieskompensowanych). Na podstawie widm uzyskanych za pomocą powierzchniowo wzmocnionej spektroskopii ramanowskiej (SERS) wyznaczono strukturę i konformację cząsteczek stabilizatorów zaadsorbowanych na powierzchni nanocząstek. Atomowa spektrometria absorpcyjna (ASA) posłużyła do oznaczenia kinetyk uwalniania jonów srebra z powierzchni nanocząstek dla kontrolowanych warunków temperatury, natlenienia, pH oraz siły jonowej.

W rezultacie udało się opracować warunki syntezy trzech typów kulistych nanocząstek srebra o średniej wielkości 10 nm, które charakteryzowały się odmiennym ładunkiem powierzchniowym, strukturą warstwy stabilizującej oraz profilem uwalniania jonów srebra. Nanocząstki stabilizowane za pomocą anionów cytrynianowych wykazywały najbardziej ujemną wartość potencjału zeta ($\zeta = -55 \pm 2$ mV dla pH 7,4, $I = 0,01$ M) spośród badanych, a ponadto były odporne na proces utleniającego roztwarzania. Niemodyfikowane nanocząstki srebra, otrzymane przy pomocy borowodoru sodu, również posiadały ujemny ładunek powierzchniowy ($\zeta = -32 \pm 2$ mV dla pH 7,4, $I = 0,01$ M) jednakże były bardziej podatne na proces roztwarzania niż nanocząstki stabilizowane anionami cytrynianowymi. Profil uwalniania srebra jonowego z powierzchni nanocząstek uzyskanych przy pomocy borowodoru sodu pokrywała się z profilem uzyskanym dla dodatnio naładowanych nanocząstek ($\zeta = +47 \pm 2$ mV dla pH 7,4, $I = 0,01$ M) stabilizowanych za pomocą kationów 2-aminotioetanolu.

PROJEKTY BADAŃ STOSOWANYCH NCBiR

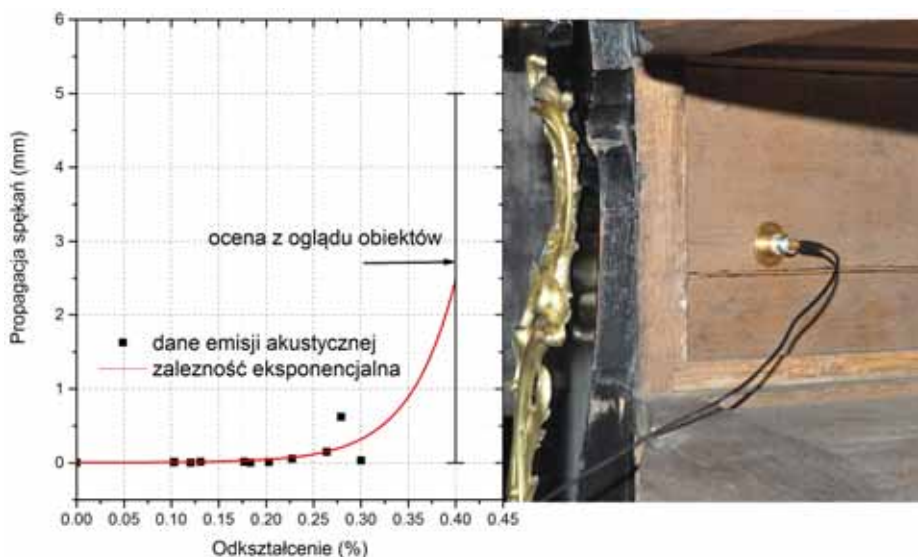
1. HERIVERDE Efektywność energetyczna instytucji muzealnych i bibliotecznych



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

Głównym osiągnięciem projektu jest HERIE – dostępne w sieci oprogramowanie do ilościowej oceny zagrożenia drewnianych obiektów wrażliwych na zmiany parametrów klimatu (adres w sieci herie.mnk.pl). Oprogramowanie to analizuje wpływ - na dany obiekt - rocznych (lub kilkuletnich) zmian wilgotności względnej, zmierzonych w określonej sali lub wynikających z proponowanych scenariuszy regulacji klimatu. Oprogramowanie dostarcza pełny przebieg czasowy odkształcenia, jakiemu podlegał badany obiekt w odpowiedzi na interesujący użytkownika mikroklimat oraz wskaźnik zagrożenia w oparciu o odpowiednie kryteria zagrożenia uszkodzeniem.

Kryteria zagrożenia stosowane dotychczas do oceny zagrożenia opracowano na podstawie badań laboratoryjnych właściwości mechanicznych drewna i zaprawy gruntującej – materiałów wchodzących w skład struktury drewna polichromowanego. W obecnej fazie projektu, posłużono się propagacją spękań w elementach drewnianych o ograniczonej odpowiedzi wymiarowej jako alternatywną miarą zagrożenia uszkodzeniem. Informacje dotyczące zależności pomiędzy propagacją istniejących spękań a odkształceniem w elementach drewnianych uzyskano z wcześniejszego monitorowania obiektów drewnianych w muzeach przy zastosowaniu metody emisji akustycznej opartej na pomiarze fal dźwiękowych emitowanych przez materiały w czasie procesów pęknięcia (Rysunek 1). Dalsze informacje o zależności odkształcenie – propagacja pęknięcia uzyskano z badań porównujących obecny stan zachowania zabytkowych mebli ze stanem utrwalonym na zdjęciach archiwalnych.



Rysunek 1. Propagacja spękań jako funkcja odkształcenia skurczowego zachodzącego w elementach mebli (po lewej). Dane dla małych odkształceń uzyskano z monitorowania emisji akustycznej przy użyciu czujników położonych w pobliżu końców istniejących spękań (po prawej).

Przebiegi czasowe odkształceń pojawiających się w elementach drewnianych o ograniczonej odpowiedzi wymiarowej są połączeniem wielu cykli pęcznienia i skurczu. HERIE wyznacza elementarne cykle odkształcenia, którym przypisuje wielkości przyrostu spękań. W ten sposób wskaźnik zagrożenia jest łatwy do interpretacji jako narastanie uszkodzenia w odpowiedzi na specyficzną fluktuację mikroklimatu.

Oprogramowanie HERIE ma charakter otwarty, z postępem badań, stanie się platformą długofalowego gromadzenia danych. Algorytmy używane przez oprogramowanie będą udoskonalane w miarę coraz lepszego poznawania mechanizmu powstawania uszkodzeń, również będzie poszerzana baza obiektów dziedzictwa, które można poddawać analizie.

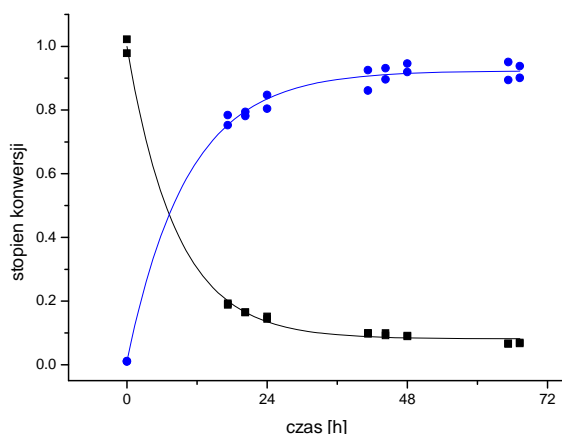
PROJEKTY NCBiR "LIDER"

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 2016 realizowano trzy ostatnie zadania: zadanie 7. Zwiększenie skali biosyntezy, zadanie 8. Opracowanie metody izolacji i oczyszczania produktów reakcji, zadanie 9. Opis techniczny know-how oraz promocja projektu. W zadaniu 7 przeprowadzono eksperyment demonstrujący jednoetapową syntezę kalcyfediolu z witaminy D₃ z zastosowaniem bakteryjnego katalizatora S25DH stosując reaktor okresowy o pojemności 1 L. Preparat enzymatyczny izolowano z bakterii *S. denitrificans* otrzymując katalizator o aktywności S25DH. Preparat enzymatyczny posłużył do zasilenia reaktora okresowego o objętości całkowitej 700 ml. W skład reaktora weszły: 2-metoksyetanol, propylowana cyklodekstryna, K₃(Fe(CN)₆), K₂HPO₄/KH₂PO₄ pozwalające utrzymać stałego pH. W reaktorze monitorowano pH oraz temperaturę. W wyniku aktywności biokatalizatora S25DH przeprowadzono hydroksylację witaminy D₃ z konwersją 90%.



A)

Rysunek 1. A) Przebieg hydroksylacji cholekalcyferolu (czarna linia) do kalcyfediolu (niebieska linia), B) pilotażowa instalacja pół-techniczna wyposażona w mieszadło mechaniczne, termostat i kontrolę pH.

Kalcyfediol był izolowany metodą ekstrakcji ciecz-ciecz i oczyszczany z zastosowaniem chromatografii preparatywnej w fazie normalnej na złożu krzemionkowym. Metoda ekstrakcji była opracowana w ramach zadania 8. Produkt został przetestowany pod względem czystości przez zewnętrzne laboratorium i spełniał wymogi farmakopei. Analogiczna synteza została wykonana na przykładzie produkcji 25-hydroksycholesterolu z cholesterolu. Niestety obniżenie skali procesu do 350 ml i zastosowanie jako reaktora okresowego szklanej butelki z mieszaniem magnetycznym okazało się być mniej efektywne. Zastosowane mieszadło magnetyczne generowało lokalnie znaczący wzrost temperatury, który skutkowało przegrzaniem katalizatora i w efekcie jego dezaktywacją. W ramach zadania 9 nawiązano współpracę z partnerem przemysłowym. Ustalono szczegóły przeprowadzenia wdrożenia, którego realizację rozpoczęto w końcu roku 2016.

W ramach promocji projektu przygotowano oferty technologiczne, które zdeponowano na serwerze pharmalicese.com, tto.lifescience.pl oraz artykuły promocyjne w periodyku *biotechnologia* i na platformie biotechnologia.pl. Wyniki projektu opublikowano również w *Applied Microbiology and Biotechnology*.

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 rozwiązania 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 grupowały się w sześciu grupach roboczych (WGs). Odpowiadały 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 były 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 koncentrowały się na procesach syntezy nanocząstek i innych nano-koloidalnych materiałów, ich kinetyce i zastosowaniu w katalizatorach. Działalność grup roboczych 5 i 6 dotyczyła aplikacji nanomateriałów i nowych procesów nanotechnologicznych w praktyce.

Oficjalną stronę Akcji można znaleźć pod adresem: <http://projects.um.edu.mt/cm1101/>. W styczniu 2016 zakończono realizację projektu COST CM1101.



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

Projekt EU COST Action CM1305 ECOSTBio [2012-2018]
(koordynator krajowy: prof. Ewa Broclawik)

W ramach akcji ECOSTBio CM1305 (2014-2018) tworzona jest sieć grup zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych dla rozwiązywania różnorodnych problemów chemicznych, w których spin jest znaczącym czynnikiem. Głównym zadaniem jest stworzenie bazy stanów spinowych „SPINSTATE” zawierającej dostępne dane dla układów o znanych stanach spinowych oraz spinowo zależnych właściwościach. Współpraca doświadczenia z teorią powinna spowodować synergiczny wzrost dostępnej informacji i pomóc zarówno teoretykom uzasadniać rozważania modelowe, jak i doświadczalnikiem tworzyć nowe materiały o ulepszonych właściwościach. Zgodnie z planem akcji utworzono cztery grupy robocze: WG1 – baza danych „SPINSTATE”, WG2 – enzymatyczne stany spinowe, WG3 – zjawiska typu spin-crossover oraz WG4 – biomimetyczne stany spinowe.

W roku 2016 zostały zrealizowane dwa spotkania organizacyjno-naukowe: IV warsztaty naukowe w Pradze, 13-15 kwietnia, oraz V warsztaty naukowe w Krakowie, 8-9 września. Warsztaty naukowe w Krakowie zostały zorganizowane przez Instytut Katalizy PAN oraz Wydział Chemii UJ; głównymi organizatorami byli: prof. Ewa Broclawik i prof. Tomasz Borowski (IKiFP) oraz dr. Mariusz Radoń (UJ). W spotkaniu wzięło udział 55 uczestników z 28 krajów wchodzących do tej akcji COST.

Jedno stypendium naukowe typu STSM (Short Term Scientific Mission) zostało przyznane młodemu pracownikowi IKiFP PAN w 2016 roku. Dr Mariusz Gackowski przebywał trzy miesiące w Stuttgarcie w grupie prof. M. Hungera. Przedmiotem było przeszkolenie specjalistyczne w laboratorium magnetycznego rezonansu jądrowego oraz ustanowienie długoterminowej współpracy i wspólnych badań pomiędzy IKiFP PAN a Instytutem Technologii Chemicznej Uniwersytetu w Stuttgarcie.

3. PoCheMoN Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience



Projekt EU COST Action CM1203 PoCheMoN [2012-2016]

(przedstawiciel: prof. Bogdan Sulikowski)

Uleniająca desulfuryzacja paliw węglowodorowych przy użyciu specjalnych cieczy jonowych

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

W ostatnim okresie, w ramach badań nad zastosowaniem heteropolikwasów i ich prekursorów w procesie oksydacyjnej desulfuryzacji paliw węglowodorowych z wykorzystaniem cieczy jonowych, realizowano dwa zadania:

- Badania nad oksydacyjną desulfuryzacją paliw węglowodorowych z wykorzystaniem hydrofobowych cieczy jonowych i wybranych prekursorów heteropolikwasów (kwas molibdenowy, kwas wanadowy i kwas poliwanadowy). Badania nad wykorzystaniem prekursorów heteropolikwasów w procesie oksydacyjnej desulfuryzacji (dibenzotiofen) pozwoliły ustalić, że najwyższą efektywność (stopień usunięcia S) charakteryzują się układy katalityczne $[C_8mim]OTf/kwas\ molibdenowy$; $[C_8mim]NTf_2/kwas\ molibdenowy$ (> 95% desulfuryzacji); a także $[bmim]HSO_4/kwas\ molibdenowy$ (> 75% desulfuryzacji). Próby przeniesienia powyższych układów do procesu usuwania tiofenu z paliw węglowodorowych jak na razie nie doprowadziły do spodziewanych rezultatów.
- Synteza nowych cieczy jonowych z anionami POM ($[Rmim]H_5PMo_9V_3O_{10}$) i wstępne próby aplikacji do procesu oksydacyjnej desulfuryzacji paliw węglowodorowych. Synteza cieczy jonowych typu $[Rmim]H_5PMo_9V_3O_{10}$ zakończyła się niepowodzeniem. Podczas prób ich dehydratacji, która jest istotna z punktu widzenia stabilności i późniejszego wykorzystania w roli katalizatorów, zaobserwowano bowiem proces częściowego rozkładu cieczy jonowych.



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 Małyśa*)

W pracach Akcji COST MP1106 uczestniczyli - w okresie od 11.05.2012 do 10.05.2016 - pracownicy naukowcy IkiFP PAN wraz z zespołami badawczymi z 31 krajów europejskich. Koordynatorem projektu był prof. Thodoris Karapantsios z Aristotle University of Thessaloniki, Grecja, a prof. Kazimierz Małyśa z IkiFP PAN był polskim przedstawicielem w Management Committee COST MP1106.

Ostatnie posiedzenie Management Committee Akcji COST MP1106 odbyło się w Atenach 4 maja 2016 w trakcie Konferencji "Smart & Green Interfaces" zorganizowanej w Atenach w dniach od 4 do 6 maja 2016 r., łącznie z dorocznym spotkaniem tzw. "Working Groups" Akcji COST MP1106. Pracownicy naukowcy z IkiFP PAN (3 osoby) uczestniczyli w tej konferencji i przedstawili następujące referaty i plakaty:

1. J. Zawala, P.B. Kowalczyk, D. Kosior, J. Drzymala, K. Małyśa, "A Correlation Between Kinetics of Bubble Attachment to Solids and Flotation Efficiency", (oral)
2. M. Krzan, "Influence of bubble wake development on bubble motion in surfactant solutions", (oral)
3. A. Wiertel, J. Zawala, K. Małyśa, "Kinetics of bubble coalescence at surfaces of different fluids – influence of external disturbances and size of the liquid films formed", (poster)
4. M. Krzan, E. Jarek, H. Petkova, E. Santini, V. Ungalanthan, M. Lofti, A. Javadi, E. Mileva, P. Warszynski, R. Todorov, F. Ravera, L. Liggieri, R. Miller, D. Exerowa, "Biodegradable aqueous foams based on xantan and gellan gums", (poster)
5. M. Krzan, "Influence of n-alkanol chain length on local and terminal velocities of rising bubbles", (poster)

Dr Jan Zawala z IkiFP PAN aplikował i uzyskał finansowanie z Akcji COST P1106 na 2-tygodniowy (w okresie od 13-26 marca 2016) wyjazd badawczy STSM do TIPs (Transfer, Interfaces & Processes) laboratory, Faculty of Applied Science Universite Libre de Bruxelles, Belgia. Celem tego STSM było opracowanie pod kierunkiem prof. Benoit Scheid modelu opisu wyciekania cieczy z cienkich filmów ciekłych powstających w trakcie kolizji pęcherzyków z powierzchnią międzyfazową ciecz/gaz.

**PROJEKTY POLSKO NORWESKIEJ
WSPÓŁPRACY BADAWCZEJ**

1. NANONEUCAR Nanoparticulate Delivery Systems for Therapies Against Neurodegenerative Diseases



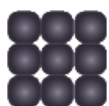
Projekt Programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej
199523/64/2013 NANONEURAC (core) [2013-2016]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszzyński)

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

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

W 2016 roku skupiono się na preparatyce oraz modyfikacji nanokapsulek zawierających makromolekularne neuroprotekcyjne czynniki aktywne. Rdzenie nanokapsulek otrzymano poprzez kompleksację katalazy z przeciwnie naładowanym polielektrolitem. Taki makromolekularny kompleks został enkapsulowany w powłokach polielektrolitowych. Polielektrolitowe powłoki multiwarstwowe tworzono metodą sekwencyjnej adsorpcji biokompatybilnych polielektrolitów (metoda warstwa po warstwie). 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. Prowadzono również prace dotyczące algorytmów pozwalających na obliczenia kinetyki uwalniania substancji czynnych z nanokapsulek z powłoką polimerową.



2. 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 domieszkiwania krzemu aby wytworzyć konieczne złącza.

Partnerami zewnętrznymi projektu są SINTEF Materials and Chemistry oraz Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej Polskiej Akademii Nauk. 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 lub borem, w zależności od typu otrzymanego złącza, jest wykonywane z obojętnych dla środowiska ciekłych źródeł w przeciwieństwie do toksycznego i kłopotliwego w użyciu POCl₃ lub BBr₃ znajdujących zastosowanie w przemyśle. W projekcie uzyskano źródła fosforu oraz boru pozwalające na wytworzenie odpowiedniego profilu domieszki oraz na uzyskanie sprawności ogniwa analogicznej do otrzymanej z wykorzystaniem POCl₃ lub BBr₃ przy znaczącym obniżeniu kosztów procesu. Dodatkowo, otrzymane szkliwa powierzchniowe zawierające w swoim składzie fosfor lub bor wykazywały łatwość usuwania/trawienia, co jest istotne dla zastosowania przemysłowego.

INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE

1. Immobilization of metal nanoparticles on organo-modified layered silicates

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

Tematem prowadzonych badań była immobilizacja i stabilizacja metalicznych nanocząstek rutenu na nośnikach otrzymanych w wyniku modyfikacji polikationami polimeru minerałów ilastych, aktywnych w reakcji uwodornienia 2-butanonu. W celu otrzymania organicznej pochodnej warstwowego krzemianu, sodową formę naturalnie występującego smektytu - Jelszowego Potoku (JP) poddano delaminacji w wodzie destylowanej, a następnie wymianie na długie łańcuchy polimeru chlorku polidiallilodimetyloamonowego (PDDA) o masie cząsteczkowej 400 000-500 000. Otrzymano dwa kompozyty organo-mineralne różniące się zawartością polimeru wprowadzonego w przestrzeń międzywarstwową minerału JP o stosunku wagowym JP:PDDA równym 1:0,05; 1:0,25. Organiczne pochodne posłużyły, jako nośniki i stabilizatory cząstek metalicznych otrzymanych w wyniku wprowadzenia kationów Ru z wodnego roztworu zawierającego 2% RuCl_3 w stosunku do JP, a następnie ich redukcji za pomocą NaBH_4 .

Zastosowano 3 różne podejścia immobilizacji Ru na nośnikach kompozytowych różniących się zawartością PDDA: w pierwszym kationy Ru wprowadzono bezpośrednio do kompozytów JP-PDDA a następnie je zredukowano, w drugim podejściu zredukowany układ Ru-PDDA interkalowano pomiędzy warstwy JP, w trzecim Ru-PDDA zredukowano po zakotwiczeniu na i między warstwami JP. Jako referencję otrzymano układy Ru-JP nie zawierające komponenty polimerowej.

Ilość polimeru wpłynęła na konfigurację i stopień uporządkowania polikationów PDDA w przestrzeniach międzywarstwowch JP. Analiza XRD wykazała wzrost odległości d_{001} w materiale JP-PDDA_1:0,05 (1,45nm) w stosunku do układu niemodyfikowanego (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 (1,55 nm). Wprowadzenie Ru skutkowało otrzymaniem kompozytów, których odległość międzypłaszczyznowa różniła się od wartości odpowiadających im organicznym pochodnym. O ile w kompozycie Ru-JP-PDDA_1:0,05 odległość d_{001} nieznacznie powiększyła się nie przekraczając wartości 1,5 nm, to kompozyty JP-PDDA-1:0,25 charakteryzowały się przesunięciem wartości d_{001} do 1,86 nm.

Analizy SEM-EDX oraz XRF potwierdziły wprowadzenie Ru w strukturę modyfikowanych minerałów ilastych oraz zdyspergowanie cząstek metalicznych w otrzymanych kompozytach, zależne od zawartości PDDA. Kompozyty z mniejszą ilością PDDA (JP-PDDA_1: 0,05) zawierały ok 1,56 % Ru, w kompozytach o większej zawartości PDDA (JP-PDDA_1: 0,25) ilość Ru była mniejsza i wynosiła 1,32-1.39 % Ru. Badania TEM wykazały, że rozmiar i stan agregacji syntezowanych nanocząstek metalicznego Ru zależy od metody ich immobilizacji oraz wpływa na aktywność otrzymanych katalizatorów w reakcji uwodornienia 2-butanonu do butanolu. Najwyższą 82 % konwersję 2-butanonu wykazał katalizator, charakteryzujący się największą wielkością klasterów Ru (ok. 5 nm), otrzymany w wyniku poprzedzającej interkalację redukcji układu Ru-PDDA. Pozostałe katalizatory o mniejszej wielkości krystalitów Ru (2-3 nm) wykazywały aktywność katalityczną rzędu 5-30 %.

Prowadzone badania wykazały, że wielkość krystalitów oraz ich podatność na reutlenienie mają bardzo duże znaczenie na prowadzoną reakcję uwodornienia 2-butanonu. Zastosowanie przyjaznych środowiskowo minerałów ilastych do reakcji katalitycznych ma istotne znaczenie 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 2015-1-PL01-KA103-014791 [2015-2016]

Projekt 2016-1-PL01-KA103-023786 [2016-2017]

(koordynator programu; dr Aleksandra Pacuła)

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

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

W roku 2016 zrealizowano następujące wyjazdy doktorantów (2-4,5 miesięczne praktyki):

- Joanna Miąsik – Pierre and Marie Curie University, Paryż
- Karolina Podgórna – University of Chemistry and Technology, Praga
- Karolina Tokarczyk – University of Strathclyde, Glasgow
- Magdalena Włodek – University of Bristol, Bristol

oraz pracowników (kilkudniowe szkolenia):

- Barbara Jachimska – University of Strathclyde, Glasgow
- Barbara Jachimska – University of Limerick, Limerick
- Marcel Krzan – Institute of Physical Chemistry, Bulgarian Academy of Science, Sofia
- Marcel Krzan – University of Chemistry and Technology, Praga
- Arkadiusz Kupczak – Eindhoven University of Technology, Eindhoven
- Michał Mosiałek – Vilnius University, Wilno
- Anna Micek-Ilnicka – University of Catania, Katania
- Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk – University of Santiago de Compostela, Santiago de Compostela
- Mateusz Tataruch – Philipps-University, Marburg

Efektom zagranicznych pobytów było m.in. zebranie materiału badawczego do 4 prac doktorskich, do 3 artykułów w czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu i do 6 prezentacji konferencyjnych (plakatów i komunikatów) na krajowych i zagranicznych konferencjach naukowych.

Program będzie kontynuowany w roku 2017 (przewidywane są jeszcze 3 wyjazdy doktorantów i 3 wyjazdy pracowników), a na rok szkolny 2017/2018 złożono kolejny wniosek o finansowanie.

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2016

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. M.Bonarowska, Z.Karpiński, R.Kosydar, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, J.Szlachetko, D.L.A.Fernandes, J.Sa "Hydrodechlorination Using Pd–Au Nanoparticles to Convert Chloro-Containing Compounds to Useful Chemicals", in: "Reference Module in Materials Science and Materials Engineering 2016" (S.Haasmi, ed.), Elsevier 2016, pp.1-15 [ISBN 978-0-12-803581-8]
2. M.Góra, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, B.Kozik, K.Jamroży, D.Dronka-Góra "Wpływ soli nieorganicznych i środków powierzchniowo czynnych na proces wstępnej hydrolizy celulozy i materiałów lignocelulozowych", in: "Biorafineryjne wytwarzanie paliw alternatywnych – uwarunkowania procesowe" (M.K.Łuczyński, J.Gołaszewski, eds.), Wydawnictwo UWM, Olsztyn 2015, pp.37-54 [ISBN 978-83-8100-036-9] printed 2016
3. A.Kupczak, L.Krzemień, A.Sadłowska-Sałęga, J.Radoń, R.Kozłowski "Modelling impact of collections on indoor climate and energy consumption in libraries and archives", in: "Energy Efficiency and Comfort in Historic Buildings" (M.de Bouw, S.Dubois, L.Dekeyser, Y.Vanhellemont, ed.), Flanders Heritage Agency, Brussels 2016, pp.112-118
4. I.Malsch, D.Rutkowska-Żbik, A.Duschl, M.Himly, T.Zadrożny, C.Kiparissides, O.Kammona, M.Talesnik, Y.Rothschild, D.Rosenberg, B.Szafran, P.Queipo Rodriguez, I.Lynch "Nanotechnology educational gaps for industry and society", in: "Managing Risk in Nanotechnology: Topics in Governance, Assurance and Transfer" (M.Mullins, F.Murphy, E.M.McAlea, eds.), Springer, Dordrecht 2016, pp.93-115 [ISBN 978-3-319-32390-9]

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

1. Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas, D.Lupa "Oxidative dissolution of silver nanoparticles: A new theoretical approach", *J. Colloid Interface Sci.*, 469 (2016) 355-364
2. J.Adamski, J.Kochana, P.Nowak, A.Parczewski "On the electrochemical biosensing of phenolic compounds in wines", *J. Food Comp. Anal.*, 46 (2016) 1-6
3. D.J.Babilas, E.Urbańczyk, M.M.Sowa, A.Maciej, D.M.Korotin, I.S.Zhidkov, M.Basiaga, M.Krok-Borkowicz, L.Szyk-Warszyńska, E.Pamuła, E.Z.Kurmaev, S.O.Cholakh, W.Simka "On the electropolishing and anodic oxidation of Ti-15Mo allo", *Electrochim. Acta*, 205 (2016) 256-265
4. A.Barbasz, B.Kreczmer, M.Oćwieja "Effects of exposure of callus cells of two wheat varieties to silver nanoparticles and silver salt (AgNO₃)", *Acta Physiologiae Plantarum*, 38, (2016) 76
5. 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.*, 11 (2016) 564-580

6. P.Batys, P.Weroński, M.Nosek "Wet formation and structural characterization of quasi-hexagonal monolayers", *J. Colloid Interface Sci.*, 461 (2016) 211-214
7. P.Batys, P.Weroński, M.Nosek, M.Skoczek "Effective diffusivity of colloidal particle multilayers", *Colloids Surf. A*, 510 (2016) 176-182
8. P.Borowiecki, D.Paprocki, A.Dudzik, J.Plenkiewicz "Chemoenzymatic Synthesis of Proxyphylline Enantiomers", *J. Org. Chem.*, 81 (2016) 380-395
9. A.Bratak-Skicki, P.Żeliszewska, J.M.Ruso "Fibrinogen: journey into biotechnology", *Soft Matter*, 12 (2016) 8639-8653
10. K.Brylewska, K.A.Tarach, W.Mozgawa, Z.Olejniczak, U.Filek, K.Góra-Marek "Modification of ferrierite through post-synthesis treatments. Acidic and catalytic properties", *J. Mol. Struct.*, 1126 (2016) 147-153
11. L.Cristofolini, K.Szczepanowicz, D.Orsi, T.Rimoldi, F.Albertini, P.Warszyński "Hybrid polyelectrolyte/Fe₃O₄ nanocapsules for hyperthermia applications", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 8 (2016) 25043-25050
12. K.Cvejcin, M.Śliwa, L.Manjakkal, J.Kulawik, G.Stojanović, D.Szwagierczak "Impedancemetric NO sensor based on YSZ/perovskite neodymium cobaltite operating at high temperatures", *Sensors Actuators B.*, 228 (2016) 612-624
13. W.Dec, M.Mosiąlek, R.P.Socha, M.Jaworska-Kik, M.Woszczak, W.Simka, J.Michalska "The effect of sulphate-reducing bacteria biofilm on passivity and development of pitting on 2205 duplex stainless steel", *Electrochim. Acta*, 212 (2016) 225-236
14. R.Dębek, M.Motak, D.Duraczyńska, F.Launay, M.E.Galvez, T.Grzybek, P.Da Costa "Methane dry reforming over hydrotalcite-derived Ni–Mg–Al mixed oxides: the influence of Ni content on catalytic activity, selectivity and stability", *Catal. Sci. Technol.*, 6 (2016) 6705-6715
15. A.Dziedzicka, B.Sulikowski, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Catalytic and physicochemical properties of modified natural clinoptilolite", *Catal. Today*, 259 (2016) 50-58
16. K.Freindl, T.Ossowski, M.Zajac, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, E.Madej, T.Giela, A.Kiejnia, J.Korecki "Oxygen Adsorption on the Fe(110) Surface: The Old System - New Structures", *J. Phys. Chem. C*, 120 (2016) 3807-3813
17. M.Gackowski, E.Bielańska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, M.Derewinski "Deposition of zeolite nanoparticles onto porous silica monolith", *Surface Innov.*, 4 (2016) 88-101
18. E.I.García-López, G.Marcì, F.R.Pomilla, A.Kirpsza, A.Micek-Ilnicka, A.Palmisano "Supported H₃PW₁₂O₄₀ for 2-propanol (photo-assisted) catalytic dehydration in gas-solid regime: The role of the support and of the pseudo-liquid phase in the (photo)activity", *Appl. Catal. A*, 189 (2016) 252-265

19. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, J.Gurgul, B.Dembińska, P.J.Kulesza, A.Drelinkiewicz "Carbon-supported Pd_xPt_y nanoparticles for oxygen reduction The effect of Pd/Pt ratio", *Electrochim. Acta*, 222 (2016) 1220-1233
20. K.Górniak, T.Szydłak, A.Gaweł, A.Klimek, A.Tomczyk, B.Sulikowski, Z.Olejniczak, J.Motyka, E.M.Serwicka, K.Bahranowski "Commercial bentonite from the Kopernica deposit (Tertiary, Slovakia): a petrographic and mineralogical approach", *Clay Minerals*, 51 (2016) 97-124
21. M.Grabowski, K.M.Langner, M.Cymborowski, P.Porębski, P.Sroka, H.P.Zheng, D.V.Cooper, M.D.Zimmerman, M.-A.Elsiger, S.K.Burley, W.Minor "A public database of macromolecular diffraction experiments", *Acta Cryst. D*, 72 (2016) 1181-1193
22. H.Guesmi, R.Gryboś, J.Handzlik, F.Tielens "Characterization of tungsten monomeric oxide species supported on hydroxylated silica; a DFT study", *RSC Adv.*, 6 (2016) 39424-39432
23. J.Handzlik, R.Gryboś, F.Tielens "Isolated Chromium(VI) Oxide Species Supported on Al-Modified Silica: A Molecular Description", *J. Phys. Chem. C*, 120 (2016) 17594-17603
24. J.Heider, M.Szaleniec, B.M.Martins, D.Seyhan, W.Buckel, B.T.Golding "Structure and Function of Benzylsuccinate Synthase and Related Fumarate-Adding Glycyl Radical Enzymes", *J. Mol. Microbiol. Biotechnol.*, 26 (2016) 29-44
25. J.Heider, M.Szaleniec, K.Sunwoldt, M.Boll "Ethylbenzene Dehydrogenase and Related Molybdenum Enzymes Involved in Oxygen-Independent Alkyl Chain Hydroxylation", *J. Mol. Microbiol. Biotechnol.*, 26 (2016) 45-62
26. K.Hnida, S.Baessler, J.Mech, K.Szaciłowski, R.Socha, M.Gajewska, K.Niensch, M.Przybylski, G.Sulka "Electrochemically deposited nanocrystalline InSb thin films and their electrical properties", *J. Mater. Chem. C*, 2016) 1345-1350
27. G.Iglesias, A.V.Delgado, M.Kujda, M.M.Ramos-Tejada "Magnetic hyperthermia with magnetite nanoparticles: electrostatic and polymeric stabilization", *Colloid Polymer Sci.*, 294 (2016) 1541-1550
28. B.Jachimska, K.Tokarczyk "Combining Surface Plasmon Resonance and Quartz Crystal Microbalance To Determine Hydration of Dendrimer Monolayers", *J. Phys. Chem. C*, 120 (2016) 19678-19685
29. 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
30. E.Jarek, P.Warszyński, M.Krzan "Influence of different electrolytes on bubble motion in ionic surfactants solutions", *Colloids Surf. A*, 505 (2016) 171-178
31. J.Juhaniewicz, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, S.Sęk "Interaction of Cecropin B with Zwitterionic and Negatively Charged Lipid Bilayers Immobilized at Gold Electrode Surface", *Electrochim. Acta*, 204 (2016) 206-217

32. I.Kocemba, J.Rynkowski, J.Gurgul, R.Socha, K.Łątka, J.-M.Krafft, S.Dzwigaj "Nature of the active sites in CO oxidation on FeSiBEA zeolites", *Appl. Catal. A*, 519 (2016) 16-26
33. M.Kołodziej, A.Drelinkiewicz, E.Lalik, J.Gurgul, D.Duraczyńska, R.Kosydar "Activity/selectivity control in Pd/H_xMoO₃ catalyzed cinnamaldehyde hydrogenation", *Appl. Catal. A*, 515 (2016) 60-71
34. Ł.Kończak, J.Narkiewicz-Michalek, G.Pastorin, T.Pańczyk "Effects of intermolecular interactions on the stability of carbon nanotube-gold nanoparticle conjugates in solution", *Int. J. Nanomedicine*, 11 (2016) 5837-5849
35. M.Kopeć, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, P.Nowak "Liquid-core polyelectrolyte nanocapsules produced by membrane emulsification as carriers for corrosion inhibitors", *Colloids Surf A*, 510 (2016) 2-10
36. D.Kosior, E.Ngo, T.Dąbrós "Determination of the Settling Rate of Aggregates Using the Ultrasound Method during Paraffinic Froth Treatment", *Energy Fuels*, 30 (2106) 8192-8199
37. P.B.Kowalczyk, J.Zawała, "A relationship between time of three-phase contact formation and flotation kinetics of naturally hydrophobic solids", *Colloids Surf. A*, 506 (2016) 371-377
38. P.Kowalczyk, J.Zawała, D.Kosior, J.Drzymala, K.Małyś "Three-Phase Contact Formation and Flotation of Highly Hydrophobic Polytetrafluoroethylene in the Presence of Increased Dose of Frothers", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 55 (2016) 839-843
39. P.Kowalczyk, J.Zawała, J.Drzymala, K.Małyś "Influence of hexylamine on kinetics of flotation and bubble attachment to the quartz surface", *Separation Sci. Technol.*, 51 (2016) 2681-2690
40. A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, T.Nożaki, S.Yuasa, J.Korecki "Growth and magnetic properties of ultrathin epitaxial FeO films and Fe/FeO bilayers on MgO(001)", *Appl. Phys. Lett.*, 108 (2016) 041606
41. 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
42. L.Krzemień, M.Łukomski, Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.F.Mecklenburg "Mechanism of craquelure pattern formation on panel paintings", *Stud. Conserv.*, 61 (2016) 324-330
43. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Cieśła "Fibrinogen adsorption mechanisms at the gold substrate revealed by QCM-D measurements and RSA modeling", *Colloids Surf. B*, 139 (2016) 123-131
44. K.Kubiak, Z.Adamczyk, J.Maciejewska, M.Oćwieja "Gold Nanoparticle Monolayers of Controlled Coverage and Structure", *J. Phys. Chem. C*, 120 (2016) 11807-11819
45. K.Kubiak-Ossowska, B.Jachimska, P.Mulheran "How Negatively Charged Proteins Adsorb to Negatively Charged Surfaces - a Molecular Dynamics Study of BSA Adsorption on Silica", *J. Phys. Chem. B*, 120 (2016) 10463-10468

46. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Cieřła "Monolayers of the HSA dimer on polymeric microparticles-electrokinetic characteristics", *Colloids Surf. B*, 148 (2016) 229-237
47. E.Lalik, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, T.Szumęda, J.Gurgul, D.Duraczyńska "A role of Au-content in performance of Pd-Au/SiO₂ and Pd-Au/Al₂O₃ catalyst in the hydrogen and oxygen recombination reaction. The microcalorimetric and DFT studies", *Appl. Catal. A*, 517 (2016) 196-210
48. J.Lewandowska-Łańcucka, K.Mystek, A.Gilarska, K.Kamiński, M.Romek, B.Sulikowski, M.Nowakowska "Silicone-stabilized liposomes as a possible novel nanostructural drug carrier", *Colloids Surf. B*, 143 (2016) 359-370
49. K.Luberda-Durnaś, A.González Guillén, W.Łasocha "Synthesis optimisation and characterisation of the organic-inorganic layered materials ZnS(m-xylylenediamine)(1/2) and ZnS(p-xylylenediamine)(1/2)", *J. Solid State Chem.*, 238 (2016) 162-169
50. 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
51. 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
52. D.Majda, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, W.Makowski "Porosity of SBA-15 after functionalization of the surface with Aminosilanes", *Microporous Mesoporous Mater.*, 234 (2016) 98-106
53. 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
54. L.Manjakkal, K.Cvejic, J.Kulawik, K.Zaraska, R.Socha, D.Szwagierczak "X-ray photoelectron spectroscopic and electrochemical impedance spectroscopic analysis of RuO₂-Ta₂O₅ thick film pH sensors", *Anal. Chim. Acta*, 931 (2016) 47-56
55. 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*, 494, (2016) 256-265
56. A.Mleczkowska, M.Strojecki, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Particle penetration and deposition inside historical churches", *Building Environ.*, 95 (2016) 291-298
57. M.Morga, Z.Adamczyk, D.Kosior "Silica Monolayer Formation and Stability Determined by in situ Streaming Potential Measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 206 (2016) 409-418
58. M.Mosiątek "Foreword", *Electrochim. Acta*. 212 (2016) 808-809

59. M.Mosiąlek, A.Kędra, M.Krzan, E.Bielańska, M.Tatko "Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-d}-La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-d} composite cathode for solid oxide fuel cell", Arch. Metal. Mater. 61 (2016) 1137-1141
60. M. Nattich-Rak, Z. Adameczyk, M. Kujda, "Revealing Deposition Mechanism of Colloid Particles on Human Serum Albumin Monolayers", Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, 137 (2016) 176-182
61. E.Niedziałkowska, O.Gąsiorowska, K.B.Handing, K.A.Majorek, P.J.Porębski, I.G.Shabalina, E.Zasadzińska, M.Cymborowski, W.Minor "Protein purification and crystallization artifacts: The tale usually not told". Protein Sci., 25 (2016) 720-733
62. J.Olszówka, R.Karcz, B.Napruszewska, E.Bielańska, 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
63. A.Pacuła, K.Uosaki, R.P.Socha, E.Bielańska, P.Pietrzyk, M.Zimowska "Nitrogen-doped carbon materials derived from acetonitrile and Mg-Co-Al layered double hydroxides as electrocatalysts for oxygen reduction reaction", Electrochim. Acta, 212 (2016) 47-58
64. T.Pańczyk, Ł.Kończak, J.Narkiewicz-Michalek, G.Pastorin "Corking and Uncorking Carbon Nanotubes by Metal Nanoparticles Bearing pH-Cleavable Hydrazone Linkers. Theoretical Analysis Based on Molecular Dynamics Simulations", J. Phys. Chem. C, 120 (2016) 639-649
65. T.Pańczyk, P.Wolski, L.Łajtar "Coadsorption of Doxorubicin and Selected Dyes on Carbon Nanotubes. Theoretical Investigation of Potential Application as a pH-Controlled Drug Delivery System", Langmuir, 32 (2016) 4719-4728
66. 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
67. W.Płaziński, M.Drach, A.Płazińska "Ring inversion properties of 1 -> 2, 1 -> 3 and 1 -> 6-linked hexopyranoses and their correlation with the conformation of glycosidic linkages", Carbohydr. Res., 423 (2016) 43-48
68. 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
69. W.Płaziński, A.Płazińska, M.Drach "Acyclic forms of aldohexoses and ketohexoses in aqueous and DMSO solutions: conformational features studied using molecular dynamics simulations", Phys. Chem. Chem. Phys., 18 (2016) 9626-9635
70. K.Podgórna, K.Szczepanowicz "Synthesis of polyelectrolyte nanocapsules with iron oxide (Fe₃O₄) nanoparticles for magnetic targeting", Colloids Surf. A, 505 (2016) 132-137
71. M.Quesne, T.Borowski, S.de Visser "Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Modeling of Enzymatic Processes: Caveats and Breakthroughs", Chem. Eur. J., 22 (2016) 2562-2581

72. R.Rabus, M.Boll, J.Heider, R.U.Meckenstock, W.Buckel, O.Einsle, U.Ermler, B.T.Golding, R.P.Gunsalus, P.M.H.Kroneck, M.Krueger, T.Lueders, B.M.Martins, F.Musat, H.H.Richnow, B.Schink, J.Seifert, M.Szaleniec, T.Treude, G.M.Ullmann, C.Vogt, M.von Bergen, H.Wilkens "Anaerobic Microbial Degradation of Hydrocarbons: From Enzymatic Reactions to the Environment", *J. Mol. Microbiol. Biotechnol.*, 26 (2016) 5-28
73. J.Radivojevic, S.Skaro, L.Senerovic, B.Vasiljevic, M.Guzik, S.T.Kenny, V.Maslak, 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
74. M.Radoń, K.Gąssowska, J.Szklarzewicz, E.Broclawik "Spin-State Energetics of Fe(III) and Ru(III) Aqua Complexes: Accurate ab Initio Calculations and Evidence for Huge Solvation Effects", *J. Chem. Theory Comput.*, 12 (2016) 1592-1605
75. B.Russell, B.Jachimska, I.Kralka, P.Mulheran, Y.Chen "Human Serum Albumin Encapsulated Gold Nanoclusters: Effects of Cluster Synthesis on Natural Protein Characteristics", *J. Mater. Chem. B*, 4 (2016) 6876-6882
76. M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Nattich-Rak "Monolayers of silver nanoparticles on positively charged polymer microspheres", *Colloids Surf A*, 499 (2016) 1-9
77. M.Sakamaki, K.Amemiya, I.Sveklo, P.Mazalski, M.O.Liedke, J.Fassbender, Z.Kurant, A.Wawro, A.Maziewski "Formation of Co nanodisc with enhanced perpendicular magnetic anisotropy driven by Ga⁺ ion irradiation on Pt/Co/Pt films", *Phys. Rev. B*, 94 (2016) 174422
78. S.Saraf, A.Mińczewska, T.Borowski, C.James, D.Tierney, M.Popova, A.Arif, L.Berreau "Anion Effects in Oxidative Aliphatic Carbon-carbon Bond Cleavage Reactions of Cu(II) Chlorodiketonate Complexes", *Inorg. Chem.*, 55, (2016) 6916-6928
79. D.Seyhan, P.Friedrich, M.Szaleniec, M.Hilberg, W.Buckel, B.T.Golding, J.Heider "Elucidating the Stereochemistry of Enzymatic Benzylsuccinate Synthesis with Chirally Labeled Toluene", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55 (2016) 11664-11667
80. M.Skoczek, M.Nosek, P.Weroński "Voltammetric monitoring of prostatesome aggregation and self-fusion", 190 (2016) 1078-1086
81. K.Sofińska, Z.Adamczyk, J.Barbasz "Mechanism of immunoglobulin G adsorption on polystyrene microspheres", *Colloids Surf. B*, 137 (2016) 183-190
82. A.Stępniewski, M.Radoń, K.Góra-Marek, E.Broclawik "Ammonia-modified Co(II) sites in zeolites: spin and electron density redistribution through the Co^{II}-NO bond", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 18 (2016) 3716-3729
83. M.Szaleniec, J.Heider "Modeling of the Reaction Mechanism of Enzymatic Radical C-C Coupling by Benzylsuccinate Synthase", *Int. J. Mol. Sci.*, 17 (2016) 514:1-22
84. K.Szczepanowicz, M.Bzowska, T.Kruk, A.Karabasz, J.Bereta, P.Warszyński "Pegylated polyelectrolyte nanoparticles containing paclitaxel as a promising candidate for drug carriers for passive targeting", *Colloids Surf. B*, 143 (2016) 463-471

85. K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Piotrowski, J.Staroń, M.Leśkiewicz, M.Regulska, W.Lasoń, P.Warszyński "Encapsulation of curcumin in polyelectrolyte nanocapsules and their neuroprotective activity", *Nanotechnol.*, 27 (2016) 355101
86. A.Szymańska, W.Nitek, M.Oszajca, W.Łasocha, K.Pamin, J.Połtowicz "Molybdenum Complexes as Catalysts for the Oxidation of Cycloalkanes with Molecular Oxygen", *Catal. Lett.*, 146 (2016) 998-1010
87. A.Szymańska-Michalak, D.Wawrzyniak, G.Framska, M.Kujda, J.Stawiński, J.Barciszewski, J.Boryski, A.Kraszewski "New 3'-O-aromatic acyl-5-fluoro-2'-deoxyuridine derivatives as potential anticancer agents", *European J. Medicinal Chem.*, 115 (2016) 41–52
88. M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Matlak, B.Matlak, P.Drożdż, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, N.Pilet, J.Raabe, A.Kozioł-Rachwał, J.Korecki "Giant in-plane magnetic anisotropy in epitaxial bcc Co/Fe(110) bilayers", *Phys. Rev. B*, 94 (2016) 014402
89. J.Ślusarczyk, M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, M.Regulska, M.Leśkiewicz, P.Warszyński, B.Budziszewska, W.Lasoń, A.Basta-Kaim "Nanocapsules with Polyelectrolyte Shell as a Platform for 1, 25-dihydroxyvitamin D3 Neuroprotection: Study in Organotypic Hippocampal Slices", *Neurotoxicity Res.*, 30 (2016) 581-592
90. E.Tabor, J.Połtowicz, K.Pamin, S.Basąg, W.Kubiak "Influence of substituents in meso-aryl groups of iron μ -oxo porphyrins on their catalytic activity in the oxidation of cycloalkanes", *Polyhedron*, 119 (2016) 342-349
91. K.A.Tarach, J.Tekla, W.Makowski, U.Filek, K.Mlekodaj, V.Girman, M.Choi, K.Góra-Marek "Catalytic dehydration of ethanol over hierarchical ZSM-5 zeolites: studies of their acidity and porosity properties", *Catal. Sci. Technol.*, 6 (2016) 3568-3584
92. M.Tatko, M.Mosiąlek, 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
93. B.Trzewik, K.Chruszcz-Lipska, A.Miłaczewska, J.Opalińska-Piskorz, R.Karcz, R.Gryboś, M.Oszajca, K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha, A.N.Fitch, B.Sulikowski, T.Borowski "Synthesis and crystal structure of dimeric 1-hydroxyhexane-2,3-dione and spectral characteristics of a model acireductone", *New J. Chem.*, 40 (2016) 9291-9303
94. V.Valmacco, M.Elżbieciak-Wodka, C.Besnard, P.Maroni, G.Trefald, M.Borkovec "Dispersion forces acting between silica particles across water: influence of nanoscale roughness", *Nanoscale Horizons*, 1 (2016) 325-330
95. V.Valmacco, M.Elżbieciak-Wodka, D.Herman, G.Trefald, P.Maroni, M.Borkovec "Forces between silica particles in the presence of multivalent cations", *J. Colloid Interface Sci.*, 472 (2016) 108-115
96. K.Valkaj, V.Tomasic, A.Katovic, E.Bielańska "Synthesis and characterization of Cu-MFI catalyst for the direct medium temperature range NO decomposition", *Mater. Sci. Poland*, 34 (2016) 177-184

97. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, T.Basińska, M.Gosecka, D.Lupa "Monolayers of Poly(styrene/ α -tert-butoxy- ω -vinylbenzyl-polyglycidol) Microparticles Formed by Controlled Self-Assembly with Potential Application as Protein-Repelling Substrates", *Langmuir*, 32 (2016) 9566-9574
98. Z.Wojdyła, T.Borowski "DFT study of the mechanism of manganese quercetin 2,3-dioxygenase: quest for origins of enzyme unique nitroxygenase activity and regioselectivity", *J. Biol. Inorg. Chem.*, 21 (2016) 475-489
99. J.Wojewoda-Budka, A.Wierzbička-Miernik, L.Lityńska-Dobrzyńska, M.Szczerba, G.Mordarski, M.Mosiąlek, Z.Huber, P.Zięba "Microstructure characteristics and phase transformations of the Ni-P and Ni-P-Re electroless deposited coatings after heat treatment", *Electrochim. Acta*, 209 (2016) 183-191
100. M.Wojnicki, E.Rudnik, M.Luty-Błoch, R.Socha, Z.Pedzich, K.Fitzner, K.Mech "Kinetic Studies of Gold Recovery from Diluted Chloride Aqueous Solutions Using Activated Carbon Organosorb 10 CO", *Austral. J. Chem.*, 69 (2016) 254-261
101. A.Wójcik, M.Radoń, T.Borowski "Mechanism of O₂ Activation by alpha-Ketoglutarate Dependent Oxygenases Revisited. A Quantum Chemical Study", *J. Phys. Chem. A*, 120 (2016) 1261-1274
102. J.Zawała ""Immortal" liquid film formed by colliding bubble at oscillating solid substrates", *Phys. Fluids*, 28 (2016) 057103
103. J.Zawała "Energy balance in viscous liquid containing a bubble: rise due to buoyancy", *Can. J. Chem. Eng.*, 94 (2016) 586-595
104. J.Zawała, D.Kosior "Dynamics of dewetting and bubble attachment to rough hydrophobic surfaces - measurements and modelling", *Minerals Eng.*, 85 (2016) 112-122
105. J.Zawała, D.Kosior, T.Dąbroś, K.Małyś "Influence of bubble surface fluidity on collision kinetics and attachment to hydrophobic solids", *Colloids Surf. A*, 505 (2016) 47-55
106. K.Ziewiec, M.Wojciechowska, A.Błachowski, K.Ruebenbauer, I.Jankowska-Sumara, K.Prusik, D.Mucha, J. Latuch "Corrigendum to "Microstructure, fracture, and thermal stability of Ni-Fe-Cu-P-B two-phase amorphous composite produced from the double chamber crucible" [*Intermetallics* 65 (2015) 15-21]", *Intermetallics*, 69 (2016) 131
107. K.Ziewiec, M.Wojciechowska, K.Prusik, D.Mucha, I.Jankowska-Sumara "The Microstructure and Thermal Stability of the Two-Component Melt-Spun Ni₅₅Fe₂₀Cu₅P₁₀B₁₀ TCMS Amorphous/Amorphous Composite", *Acta Phys. Polonica A*, 130 (2016) 927-930
108. M.Zimowska, J.Gurgul, H.Palkova, Z.Olejniczak, K.Łątka, L.Lityńska-Dobrzyńska, L.Matachowski "Structural rearrangements in Fe-porous clay heterostructures composites derived from Laponite (R) - Influence of preparation methods and Fe source", *Microporous Mesoporous Mater.*, 231 (2016) 66-81

109. M.Zimowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, Z.Olejniczak, R.Socha, J.Gurgul, K.Łątka "Alteration of the structure and surface composition of crystalline-amorphous porous clay heterostructures upon iron doping from metal-organic source", *Surf. Interface Anal.*, 48 (2016) 527-531
110. M.Zimowska, K.Łątka, D.Mucha, J.Gurgul, L.Matachowski "The continuous conversion of ethanol and water mixtures into hydrogen over Fe_xO_y/MoO_3 catalytic system - XPS and Mössbauer studies", *J. Mol. Catal. A*, 423 (2016) 92-104
111. M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Kryściak-Czerwenka, R.Dula, R.P.Socha, K.Pamin, M.Bazarnik, K.Bahranowski, Z.Olejniczak, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "A comparative study of direct versus post-synthesis alumination of mesoporous FSM-16 silica", *Mater. Res. Bull.*, 83 (2016) 623-631
112. P.Żeliszewska, A.Brątek-Skicki, Z.Adamczyk, M.Cieśla "Modelling and measurements of fibrinogen adsorption on positively charged microspheres", *Condensed Matter Phys.*, 19 (2016) 13801:1-14

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY MNiSW (LISTA B)

1. J.Czop, P.Frączek, J.M.del Hoyo-Meléndez, M.Matosz, M.Obarzanowski, J.Sobczyk, R.Kozłowski, L.Krzemień, M.Łukomski, D.Węgrzynek, P.Wiącek, P.Wróbel, Ł.Bratasz "Leonardo da Vinci Lady with an Ermine - the latest research into the artist's painting technique and the state of preservation of the painting", *Rozprawy Muzeum Narodowego w Krakowie, Seria Nowa*, 8 (2015) 229-259
2. M.Dudek, P.Tomczyk, A.Raźniak, B.Lis, M.Reben, M.Gajek, R.P.Socha "Wybrane problemy badawcze reakcji redukcji tlenu na granicy faz Pt|8YSZ", *Materiały Ceramiczne*, 68 (2016) 162-167
3. A.Gancarczyk, M.Iwaniszyn, Ł.Mokrzycki, W.Rojek, D.Duraczyńska, T.Machej, J.Kowalska, M.Jaroszyński, A.Kołodziej "VOC combustion on ceramic foam supported catalyst", *Prace Naukowe ICh PAN*, 20 (2016) 155-165
4. A.Jagusiak, B.Piekarska, K.Chłopas, E.Bielańska, T.Pańczyk "Shortening and dispersion of single-walled carbon nanotubes upon interaction with mixed supramolecular compounds", *Bio-Algorithms Med-Systems*, 12 (2016) 123-132
5. A.Kędra, M.Mosiąlek, M.Krzan, M.Tatko, M.Zimowska, E.Bielańska, E.Czerlunczakiewicz "Supporting effect of silver on BSCF cathodes for SOFC", *Materiały Ceramiczne*, 68 (2016) 70-75
6. A.Maciej, J.Michalska, W.Simka, R.Socha "Anodowa obróbka galwanicznych powłok stopowych Zn-Ni", *Ochrona przed Korozją*, 59 (2016) 363-367
7. A.Maciej, K.Matuszak, W.Simka, T.Gorewoda, R.Socha "Wpływ dodatku cieczy jonowych na bazie 2-pikoliny na strukturę anodowo utlenionych powłok stopowych Zn-Co", *Ochrona przed Korozją*, 59 (2016) 136-140

8. G.Nawrat, G.Lach, Ł.Nieużyła, P.Nowak "Twarde powłoki tlenkowe na duralu (Hard anodic coatings on duralumin)", *Ochrona przed Korozją*, 59 (2016) 154-159
9. P.Nowak, M.Mosiąlek, G.Mordarski "Badania nad stałotlenkowymi ogniwami paliwowymi (SOFC) w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN w Krakowie", *Biul. PSWiOP*, 10 (2016) 23-25
10. P.Panek, R.P.Socha, M.Juel, P.Zięba "The liquid phosphorus source for Si solar cells fabrication", *Inżynieria Materiałowa*, 4 (2016) 172-177
11. J.Szaleniec, M.Szaleniec, P.Stręk "A stepwise protocol for neural network modeling of persistent postoperative facial pain in chronic rhinosinusitis", *Bio-Algorithms Med-Systems*, 12 (2016) 81–88

POZOSTAŁE PUBLIKACJE NAUKOWE (BEZ OKREŚLONEGO IF)

1. A.Brątek-Skicki, C.Dupont-Gillain "Protein adsorption on stimuli-responsive mixed PDMAEMA/PEO polymer brushes", *FEBS J.*, 283S (2016) 316-317
2. D.Duraczyńska, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, R.Dula, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska, A.Gaweł, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Efficient and Versatile Ru/SBA-15 Catalysts for Liquid-Phase Hydrogenation of the C=C and C=O Bonds under Mild Conditions", *ChemistrySelect*, 1 (2016) 2148-2155
3. J.Maciejewska, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, E.Bieleńska, B.Napruszewska "Titanium dioxide/silver nanoparticle bilayers prepared in self - assembly processes", *Annales UMCS, Sectio AA*, 71, 1 (2016) 29-46
4. A.Micek-Ilnicka, U.Filek "Ostatnie lata pracy naukowej Pana Profesora Adama Bielańskiego", *Niedziałki*, 104 (3) (2016) 60-65
5. P.Panek, R.P.Socha, G.Putynkowski, A.Slaoui "The new copper composite of pastes for Si solar cells front electrode application", *Energy Procedia*, 92 (2016) 962-970
6. J.Staroń, E.Cichoń, M.Stefaniak, M.Guzik "Chemo-biotechnological synthesis of precursors for biocatalytic acylation of sugars", *New Biotechnol.*, 33S (2016) S106
7. M.Szaleniec, J.Heider "Enzymatic C-C bond formation by benzylsuccinate synthases – A key step in anaerobic microbial degradation of hydrocarbons", *New Biotechnol.*, 33S (2016) S140
8. M.Szaleniec, A.Rugor, T.Janeczko, M.Hochołowski, M.Guzik "Selective modifications of steroids and sterols by enzymes from bacterial cholesterol degradation pathway", *New Biotechnol.*, 33S (2016) S107
9. M.Szaleniec, A.Rugor, A.Wójcik "Steroid C25 dehydrogenase – the mechanism of regioselective hydroxylation of sterols and cholecalciferol", *New Biotechnol.*, 33S (2016) S107
10. M.Witko "Adam Bielański (1912-2016)" *Nauka* (4) (2016) 139-142

Publikacje ogłoszone w formie elektronicznej 2016

1. A.Barbasz, M.Oćwieja, S.Walas "Toxicological effects of three types of silver nanoparticles and their salt precursors acting on human U-937 and HL-60 cells", *Toxicological Mechanisms Methods* 2016, doi: 10.1080/15376516.2016.1251520.
2. A.Y.Gyurova, A.Michna, L.Nikolov, E.Mileva "Self-assembly of four-and two-antennary oligoglycines in aqueous medium", *Colloids Surf. A*, (2016), doi: 10.1016/j.colsurfa.2016.09.012
3. D.Majda, M.Zimowska, K.Tarach, K.Góra-Marek, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym "Water thermoporosimetry as a tool of characterization of the textural, parameters of mesoporous materials- Refinement of the methodology", *J Therm Anal Calorim*, (2016), doi: 10.1007/s10973-016-5400-3
4. I.Malsch, D.Rutkowska-Żbik, M.Himly, C.Kiparissides, O.Kammona, B.Szafran, I.Lynch, F.Ntow, P.Queipo Rodriguez, M.Talesnik, D.Rosenberg, A.Duschl "Current Trends in Nanoeducation for Industry and Society", *Current Bionanotechnology* 2016 (vol.2) doi: 10.2174/2213529402666160601112106
5. A.Mleczkowska, M.Strojecki, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "The effect of ventilation on soiling by particles of outdoor and indoor origin in historical churches", *Build. Simul.*,(2016). doi:10.1007/s12273-016-0335-y
6. A.F.Orliukas, V.Venckutė, S.Daugėla, A.Kežionis, A.Dindune, D.Valdniece, J.Ronis, M.Lelis, M.Mosialek, T.Šalkus "Synthesis, structure and impedance spectroscopy of NaCsZn_{0.5}Mn_{0.5}P₂O₇ pyrophosphate ceramics", *Solid State Ionics*, doi: 10.1016/j.ssi.2016.12.009
7. K.Podgórna, K.Jankowska, K.Szczepanowicz "Polysaccharide gel nanoparticles modified by the Layer-by-Layer technique for biomedical applications", *Colloids Surf.A*, doi: 10.1016/j.colsurfa.2016.07.067
8. A.Rugor, M.Tataruch, J.Staroń, A.Dudzik, E.Niedzialkowska, P.Nowak, A.Hogendorf, A.Michalik-Zym, D.B.Napruszewska, A.Jarzębski, K.Szymańska, W.Białas, M.Szaleniec "Regioselective hydroxylation of cholecalciferol, cholesterol and other sterol derivatives by steroid C25 dehydrogenase", *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, doi: 10.1007/s00253-016-7880-2
9. K.Szczepanowicz, G.Para, K.A.Wilk, P.Warszyński "Co-adsorption of polyanions and esterquat surfactants; effect on formation and stability of micellar core nanocapsules", *Colloids Surf.A*, doi: 10.1016/j.colsurfa.2016.07.069
10. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Cu²⁺ in Keggin anion - Influence of copper position on electronic structure/redox properties of heteropolyacids. DFT cluster model study", *J. Mol. Struct.*, doi: 10.1016/j.molstruc.2016.12.046
11. J.Zawała, A.Wiertel, A.Niecikowska, K.Małyś "Influence of external vibrations on bubble coalescence time at water and oil surfaces – experiments and modelling", *Colloids Surf. A.*, (2016) doi: 10.1016/j.colsurfa.2016.05.054

PUBLIKACJE Z ROKIEM WYDANIA 2017

1. M.Kowacz, M.Marchel, L.Juknaitė, J.M.S.S.Esperanca, M.J.Romao, A.L.Carvalho, L.P.N.Rebelo "Infrared light-induced protein crystallization. Structuring of protein interfacial water and periodic self-assembly", *J. Crystal Growth*, 457 (2017) 362-368
2. J.Maciejewska-Pronczuk, M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Homogenous gold nanoparticle monolayers - QCM and electrokinetic characteristics", *Colloids Surf.*, 514 (2017) 226-235
3. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Sofińska, K.Matusik "Monolayers of poly(amido amine) dendrimers on mica – In situ streaming potential measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 485 (2017) 232-241
4. H.Pálková, M.Zimowska, Ľ.Jankovič, B.Sulikowski, E.M.Serwicka, J.Madejová "Thermal stability of tetrabutyl-phosphonium and -ammonium exchanged montmorillonite: Influence of acid treatment", *Appl. Clay Sci.*, 138 (2017) 63-73
5. A.Sławińska, P.Serda, K.Pamin, J.Poltowicz, W.Łasocha, "{Synthesis, crystal structure and selected properties of a group of new peroxomolybdates", *Polyhedron*, 121 (2017) 191-198
6. P.Żeliszewska, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Monolayers of immunoglobulin G on polystyrene microparticles and their interactions with human serum albumin", *J. Colloid Interface Sci.*, 490 (2017) 587-597

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek, P.Weroński "Voltammetric studies of thin films transport properties", *Book of Abstracts. 16th Int. Conf. on Organized Molecular Films, Helsinki 2016*, p.158
2. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Ewolucja katalitycznych warstw tlenkowych aktywnych w bezpośrednim rozkładzie NO na stali austenitycznej AISI 321 pod wpływem czynników zewnętrznych", *Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.32-33 [ISBN 978-83-60514-24-5]*
3. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Wpływ składu chemicznego austenitycznej stali Cr-Ni AISI 321 na morfologię oraz skład chemiczny i fazowy powierzchniowych części katalitycznych warstw tlenkowych", *Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.93-94 [ISBN 978-83-60514-24-5]*
4. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Wpływ redukcji wodorem na skład chemiczny i fazowy katalitycznych warstw tlenkowych na folii ze stali austenitycznej Cr-Ni AISI 321", *Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.95-96 [ISBN 978-83-60514-24-5]*

5. E. Błasiak, S. Łukasiewicz, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, M. Dziejicka-Wasylewska "Biocompatible polymeric nanoparticles as promising candidates for drug delivery", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.18
6. A. Bożek, P. Serda, W. Łasocho "Polioksomolibdeniany pochodnych aniliny", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U. Filek, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.328 [ISBN 978-83-60514-24-5]
7. T. Borowski, A. Miłaczewska, Z. Wojdyła "Oxidative C-C bond cleavage by two metalloenzymes and one synthetic complex", Book of Abstracts. Conf. 'Current Trends in Theoretical Chemistry VII', Wydział Chemii UJ, Kraków, 2016 [ISBN 978-83-945177-0-0]
8. A. Bratek-Skicki, C. Dupont-Gillain "Smart Polymeric Materials for Biomedical Applications", Proc. Euro Science Open Forum ESOF, Manchester 2016
9. E. Broclawik, T. Borowski, M. Radoń, A. Stepniewski "Stany spinowe i ich znaczenie dla katalizy na centrach metali przejściowych w enzymach i nie tylko", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K. Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.59 [ISBN 978-83-65644-10-7]
10. E. Broclawik, A. Stepniewski, M. Radoń, K. Góra-Marek "High-level small-scale or periodic DFT modeling for TM centers in zeolites?", Book of Abstracts. Conf. 'Current Trends in Theoretical Chemistry VII', Wydział Chemii UJ, Kraków, 2016 [ISBN 978-83-945177-0-0]
11. Z. Brożek-Mucha, D. Mucha "Chemical, structural, and morphological characterization of metallic objects for forensic purposes", Mater. 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage (A. Rafalska-Łasocho, ed.), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Krakow 2016, pp.93-94 [ISBN 978-83-943754-5-4]
12. K. Brylewska, K. A. Tarach, W. Mozgawa, Z. Olejniczak, U. Filek, K. Góra-Marek "Hierarchiczny ferieryt: właściwości teksturalno/kwasowe w kontekście zastosowań katalitycznych", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U. Filek, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.232 [ISBN 978-83-60514-24-5]
13. M. Chojecki, S. Yourdkhani, D. Rutkowska-Żbik, T. Korona "B₄₀ molecule as a nanocontainer", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D. Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.72 [ISBN 978-83-60514-25-2]
14. A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, M. Góral-Kurbiel, J. Gurgul, M. Kołodziej, R. Kosydar, T. Szumelda "Controlling nanostructure of bimetallic Pd-M (M = Au, Ir, Pt, Ru) catalysts prepared by the reverse "water-in-oil" microemulsion method", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U. Filek, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.238-239 [ISBN 978-83-60514-24-5]
15. A. Drelinkiewicz, E. Lalik, R. Kosydar "Efekty termiczne reakcji z udziałem wodoru; wyzwanie dla technologii OZE", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K. Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.31 [ISBN 978-83-65644-10-7]

16. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "DFT mechanistic studies on Compound II oxidation of alcohols and aldehydes", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.73 [ISBN 978-83-60514-25-2]
17. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, E.Bielańska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska "Uwodornienie ketonów na przykładzie acetolu i 2-butanonu w obecności katalizatorów rutenowych naniesionych na mezoporowatą krzemionkę SBA-15", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.104-105 [ISBN 978-83-60514-24-5]
18. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, E.Bielańska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska "Uniwersalny katalizator typu Ru/SBA-15 do uwodornienia grup C=O, C=C i C≡C", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.23-24 [ISBN 978-83-60514-24-5]
19. M.Gackowski, E.Bielańska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, J.Kryściak-Czerwenka, B.Sulikowski, M.Derewiński "Silica monoliths with deposited zeolite nanoparticles as model, continuous-flow microreactors", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.17-18 [ISBN 978-83-60514-24-5]
20. M.Gackowski, Ł.Kuterasiński, E.Bielańska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, B.Sulikowski, M.Derewiński "Silica monoliths with deposited protozeolitic nanoparticles as effective microreactors for α -pinene isomerization", Book of Abstrscts. 18th Int. Zeolite Conf. Rio de Janeiro 2016, recorded on CD, poster 463
21. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, S.Jarczewski, B.Sulikowski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchiczne zeolity Y – materiały o wysokiej kwasowości, porowatości i aktywności katalitycznej", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.21 [ISBN 978-83-65644-10-7]
22. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, J.Gurgul, M.Ruggiero, G.Mordarski, L.Lityńska-Dobrzyńska, A.Drelinkiewicz "Determination of optimal metal composition in carbon supported Pd-Pt catalysts for oxygen reduction reaction", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.107-108 [ISBN 978-83-60514-24-5]
23. M.Grzesiak-Nowak, A.Rafalska-Łasocha, A.Klisińska-Kopacz, E.Cieślak, W.Łasocha "Preliminary studies of Katarzyna Kobro's gypsum sculptures", Mater. 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage (A.Rafalska-Łasocha, ed.), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Krakow 2016, pp.103-104 [ISBN 978-83-943754-5-4]

24. A.Grzesik, M.Oszajca, M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha "Evaluation of various scientific techniques applied to investigations of ancient metal objects", Mater. 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage (A.Rafalska-Łasocha, ed.), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Krakow 2016, pp.91-92107-108 [ISBN 978-83-943754-5-4]
25. D.Jantas, M.Piotrowski, M.Leśkiewicz, M.Regulska, J.Staroń, P.Warszyński, W.Lasoń, K.Szczepanowicz "Neuroprotective activity of (bio)polyelectrolyte-coated nanocapsules containing curcumin", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.19
26. E.Jarek, D.Białek-Kostecka, Z.Kaszowska, M.Kot, J.Bagniak, A.Forczek-Sajdak "Influence of synthetic polymers (vinyl and acrylic resins) used in conservation of mural painting on physicochemical properties of paint layers", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
27. R.Karcz, B.Napruszewska, A. Michalik-Zym, J.Olszówka, R.Dula, D.Duraczyńska, E.M. Serwicka "atalizatory magnezowe na nośniku SBA-15 jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.116-117 [ISBN 978-83-60514-24-5]
28. A.Kędra, M.Mosiąlek, E.Bielańska, M.Tatko "Catalysis of oxygen reduction at $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}-La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ composite cathode for solid oxide fuel cell", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.332 [ISBN 978-83-60514-24-5]
29. A.Kędra, R.Socha, Z.Starowicz, M.Zimowska, M.Lipiński, P.Warszyński "Synthesis and characterization of organic and inorganic perovskites for application in solar cells", Book of Abstracts, Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production' (R.Socha, ed.), IkiFP PAN, Krakow 2016, p.18
30. A.Kędra, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Zimowska, K.Szczepanowicz, Z.Starowicz, M.Lipiński, P.Warszyński "Interaction of plasmonic particles with light converters", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.333 [ISBN 978-83-60514-24-5]
31. A.Kida, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Micele polimerowe jako nośniki leków neuroprotecyjnych", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.158 [ISBN 978-83-60988-23-7]
32. A.Kirpsza, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Micek-Ilnicka "inetyka i mechanizm dehydratacji izopropanolu na katalizatorach typu heteropolikwas-nośnik", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.118 [ISBN 978-83-60514-24-5]
33. A.Klimek, A.Gawel, A.Tomczyk, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Sorption of carbon dioxide on Ti-, Zr- and [Ti,Zr]-pillared montmorillonites", Book of Abstracts. 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016, p.125 [ISBN 978-80-972288-0-4]

34. M.Kołodziej, R.Kosydar, E.Lalik, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Activity/selectivity control in Pd/H_xMoO₃ catalyzed cinnamaldehyde and furfural hydrogenation", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.358-359 [ISBN 978-83-60514-24-5]
35. M.Kołodziej, E.Lalik, T.Szumelda, R.Kosydar, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "A role of hydrogen bronzes in the MoO₃ and WO₃ supported Pd catalysts in activity/selectivity control for hydrogenation of furfural and cinnamaldehyde", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.120-121 [ISBN 978-83-60514-24-5]
36. M.Kołodziej, E.Lalik, T.Szumelda, R.Kosydar, J.Gurgul, D.Duraczynska, A.Drelinkiewicz "A role of H_xMoO₃ (H_xWO₃) in the Pd catalysts in activity/selectivity control for hydrogenation of unsaturated aldehydes", Book of Abstracts. 11th Int. Congr. on Catalysis and Fine Chemicals CAFC-11, Lyon 2016, p.60
37. P.Komorek, I.Kralka, K.Tokarczyk, B.Jachimska "Stopień hydratacji samoorganizujących się warstw białkowych na powierzchni złota", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.362 [ISBN 978-83-60988-23-7]
38. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Molecular Dynamics Simulations of Drug Delivery Systems based on Carbon Nanotubes and Colloidal Nanoparticles", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.79 [ISBN 978-83-60514-25-2]
39. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Żelazny, M.Ruggiero "Dimethyl ether synthesis through CO₂ hydrogenation over hybrid catalysts: effects of preparation methods and heteropoly acids", Progam & Book of Abstracts. 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Hungarian Chemical Society, Budapest 2016, p.60 [ISBN 978-963-9970-56-4]
40. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero, A.Żelazny "Synteza dimetyloeteru z mieszaniny CO₂+H₂ na katalizatorach hybrydowych - wpływ metody syntezy i dodatku heteropolikwasów na aktywność katalityczną", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.122 [ISBN 978-83-60514-24-5]
41. A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "DFT Insights on H₂ and CO₂ adsorption on small size Cu_n (n = 7, 13) clusters", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.80 [ISBN 978-83-60514-25-2]
42. A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Oddziaływanie klastra Cu₇ i Cu₁₃ z cząsteczkami wodoru i dwutlenku węgla - obliczenia DFT", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.197 [ISBN 978-83-60514-24-5]

43. R.Kosydar, M.Kołodziej, D.Macina, D.Duraczyńska, L.Chmielarz, A.Drelinkiewicz "Catalytic hydrogenation of furfural towards aliphatic alcohols. A role of support properties", Book of Abstracts. 11th Int. Congr. on Catalysis and Fine Chemicals CAFC-11, Lyon 2016, p.59
44. R.Kozłowski, A.Kupczak, Ł.Lasyk, A.Działo, Ł.Bratasz, M.Łukomski "HERIE - a web-based software for assessing risk of climate-induced damage to painted wood", Book of Abstracts. Conf. 'Wood Science and Technology II, Microclimates for Panel Paintings', Maastricht 2016, p.5
45. I.Kralka, P.Komorek, K.Tokarczyk, B.Jachimska "Określenie stopnia hydratacji warstw białkowych z zastosowaniem metod MP-SPR i QCM-D", Książka Abstraktów. Konf. 'Nanobiomateriały - teoria i praktyka', Toruń 2016 [ISBN 978-83-231-3565-4]
46. I.Kralka, K.Tokarczyk, R.Socha, B.Jachimska "Badanie porównawcze zachowania albuminy z surowicy bydłowej (BSA) na powierzchni złota z zastosowaniem metod MP-SPR i QCM-D", Książka Abstraktów. Forum of Diploma Thesis 'Horizons of Science', Jagiellonian University, Krakow 2016
47. I.Kralka, K.Tokarczyk, R.Socha, B.Jachimska "Badanie porównawcze zachowania albuminy z surowicy bydłowej (BSA) na powierzchni złota z zastosowaniem metod MP-SPR i QCM-D", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.335 [ISBN 978-83-60514-24-5]
48. A.Krawczyk, R.Socha, Z.Starowicz, M.Zimowska, M.Lipiński, P.Warszyński "Synthesis and characterization of organic and inorganic perovskites for application in solar cells", Book of Abstracts, Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production' (R.Socha, ed.), IKiFP PAN, Krakow 2016, p.18
49. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte films with the „antifouling” properties", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.478
50. M.Krzan "Influence of bubble wake, its size and shape on the bubble local and terminal velocities", Book of Abstracts. Conf. EuFoam 2016, Dublin 2016, p.78
51. M.Krzan "Influence of bubble wake development on bubble motion in surfactant solutions", Programme. Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016, p.38
52. M.Krzan "Influence of n-alcohol chain length on local and terminal velocities of rising bubbles", Programme. Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016, p.104
53. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa "Stable and biodegradable aqueous foams for industrial or biomedical applications", Book of Abstracts. Conf. EuFoam 2016, Dublin 2016, p.98

54. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa "Biodegradable aqueous foams based on xanthan and gellan gums", Programme. Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016, p.103
55. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, S.Kudłacik, K.Bialik-Wąs, A.Drabczyk, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, B.Tyliszczak, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa "Piany ciekłe wytworzone na bazie mieszanin polisacharydów do zastosowań kosmetycznych i biomedycznych", Abstrakty. Konf. 'Nowoczesna Kosmetologia – od Nauki od Biznesu', Kraków 2016, p.14
56. L.Krzemień, M.Łukomski, M.Strojecki "The effect of growth ring structure on the response of wood subjected to changing climate conditions", Mater. 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage (A.Rafalska-Łasocha, ed.), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Krakow 2016, pp.91-92 [ISBN 978-83-943754-5-4]
57. A.Kupczak, A.Sadłowska-Sałęga, L.Krzemień, J.Radoń, R.Kozłowski "Modelling impact of collections on indoor climate and energy consumption in libraries and archives", Proc. 2nd Int. Conf. on Energy Efficiency and Comfort of Historic Buildings, Brussels 2016, pp.112-118
58. Ł.Kuterasiński, B.Sulikowski, J.Kryściak-Czerwenka, A.Dziedzicka, K.Durczyk, U.Olsbye, G.Szymański, E.Włoch, E.Bielańska, M.Derewiński "Protonowe centra kwasowe w borokrzemianach o strukturze typu MFI", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.80-81 [ISBN 978-83-60514-24-5]
59. D.Lupa, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas "Kinetyka oksydacyjnego roztwarzania nanocząstek srebra", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.358 [ISBN 978-83-60988-23-7]
60. D.Lupa, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas "Mechanisms of oxidative dissolution of silver nanoparticles", Książka Abstraktów, 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
61. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, H.Mrowiec, S.Walas "Oxidative dissolution of silver nanoparticles: a new, two-step theoretical model and experimental study", Book of Abstracts. Int. Workshop on Functional Nanoporous Materials FuNaM, Krakow 2016
62. D.Lupa, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, T.Basinska, M.Gosecka "Kinetyka tworzenia i właściwości monowarstw hydrofilowych cząstek polimerowych", Książka Abstraktów. Sem. 'Samorganizacja, mikroskopia, spektroskopia', Kraków 2016
63. K.Luther, M.Krzan "Luga - Centrum Kosmetyczne S.C. – innowacyjna firma kosmetyczna", Abstrakty. Konf. 'Nowoczesna Kosmetologia – od Nauki od Biznesu', Kraków 2016, p.53

64. M.Łomzik, M.Brindell, D.Rutkowska-Żbik, G.Stochel, P.C.Gros "Synthesis and characterisation of novel ruthenium(II) complexes with pyridine-2-carboxyaldehyde semicarbazone moiety", Book of Abstracts. 3rd European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms ECRIM-2016, Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.133
65. J.Maciejewska, Z.Adamczyk, K.Kubiak, M.Oćwieja "Gold nanoparticle monolayers of controlled coverage and structure", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.337 [ISBN 978-83-60514-24-5]
66. J.Maciejewska, K.Kubiak, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Kinetics of gold nanoparticle deposition on PAH-modified gold substrate", Książka Abstraktów, 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
67. J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Morga "Monowarstwy nanocząstek złota o kontrolowanej strukturze i właściwościach", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.358 [ISBN 978-83-60988-23-7]
68. J.Maciejewska, M.Oćwieja, K.Kubiak, M.Morga, Z.Adamczyk "Formation of gold nanoparticles of controlled structure and electrokinetic properties", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.460
69. J.Maciejewska-Prończuk, M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Otrzymywanie monowarstw nanocząstek złota o kontrolowanej strukturze", Książka Abstraktów. Sem. 'Samoorganizacja, mikroskopia, spektroskopia', Kraków 2016
70. J.Maciejewska-Prończuk, M.Oćwieja, A.Węgrzynowicz, P.Michorczyk, Z.Adamczyk, M.Roman, E.Bielańska "Efficient catalyst for water gas shift reaction based on iron oxide nanoparticles doped by chromium", Book of Abstracts. Int. Workshop on Functional Nanoporous Materials FuNaM, Krakow 2016
71. J.Miąsik, Ł.Mokrzycki, W.Rojek, T.Machej, D.Duraczyńska, A.Gancarczyk, A. Kołodziej "Solid foams as structured catalyst: preparation and activity in toluene combustion reaction", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.275-276 [ISBN 978-83-60514-24-5]
72. J.Miąsik, W.Rojek, Ł.Mokrzycki, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, A.Żelazny, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Badania nad uwodornieniem alkoholu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu na katalizatorach żelazowych", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.134 [ISBN 978-83-60514-24-5]
73. J.Miąsik, W.Rojek, Ł.Mokrzycki, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, A.Żelazny, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Uwodornienie alkoholu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu na katalizatorach żelazowych", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.129 [ISBN 978-83-65644-10-7]

74. A.Micek-Ilnicka "Heteropolizwiązki – ich osobliwe właściwości fizykochemiczne, katalityczne i fotokatalityczne", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.32 [ISBN 978-83-65644-10-7]
75. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula, E.Bielańska, M.Nattich-Rak, E.M.Serwicka-Bahranowska "Composites of Laponite and Mn-Cu-Zr-Ce-Al hydrotalcites prepared by inverse microemulsion", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.249 [ISBN 978-83-60988-23-7]
76. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Rogowska, R.Dula, E.Bielańska, Ł.Mokrzycki, W.Rojek, A.Gaweł, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Montmorillonite/TiO₂ composites as supports for Mn-Al-O mixed oxide catalyst for combustion of toluene: pillaring vs. inverse microemulsion intercalation", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.277-278 [ISBN 978-83-60514-24-5]
77. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Williams, S.P.Arnes "Revealing the Formation and Stability of Fluorescently-labeled poly(ethylene imine) Monolayers on Mica via DLS and Electrokinetic Methods", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.92
78. A.Miłaczewska, E.Wierus, P.Porębski, B.Trzewik, J.Korecki, T.Makris, M.Chruszcz, W.Minor, T.Borowski "Joined computational and experimental study on the reaction mechanisms of acireductone dioxygenases", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.87 [ISBN 978-83-60514-25-2]
79. M.Motak, D.Duraczyńska, R.Dębek, D.Wierzbiński, K.Świrk, B.Samojedyn "Badania SEM nanotlenkowych katalizatorów otrzymanych na bazie hydrotalkitu w procesie DRM", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.338-339 [ISBN 978-83-60514-24-5]
80. B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Dula, E.Bielańska, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Composites derived from Laponite intercalated with Mn-Al hydrotalcite prepared by inverse microemulsion", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.279-280 [ISBN 978-83-60514-24-5]
81. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Mechanizmy osadzania nanocząstek srebra na powierzchni nośników koloidalnych", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.150 [ISBN 978-83-60988-23-7]
82. M.Nattich-Rak, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Sadowska "Determining mechanism of human fibrinogen and human albumin adsorption on mica via optical microscopy, Atomic Force Microscope and scanning electron microscope", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.341 [ISBN 978-83-60514-24-5]

83. M.Nattich-Rak, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Sadowska "Human fibrinogen adsorption mechanisms revealed by Atomic Force Microscope, streaming potential and colloid deposition measurements", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.342 [ISBN 978-83-60514-24-5]
84. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Karcz, M.Witko, E.Serwicka " Co^{2+} w strukturze heteropolikwasów HPW i HPMo o geometrii anionu Keggina – obliczenia DFT vs. badania doświadczalne", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.210-211 [ISBN 978-83-60514-24-5]
85. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Karcz, M.Witko, E.M.Serwicka "Co-modified heteropolyacids. DFT theory vs. experimental results", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.88 [ISBN 978-83-60514-25-2]
86. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Catalytic properties of modified heteropolyacids. DFT cluster model study", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.66 [ISBN 978-83-60514-25-2]
87. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Właściwości redoksove heteropolikwasów w funkcji ich składu chemicznego i struktury geometrycznej polianionu", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.212-213 [ISBN 978-83-60514-24-5]
88. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Aktywacja cząsteczki O_2 na heteropolianionach o strukturze Wellsa-Dawsona, modyfikowanych w pozycji atomu addenda", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.214-215 [ISBN 978-83-60514-24-5]
89. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Obliczenia procesu aktywacji cząsteczki O_2 na modyfikowanych HPA o strukturze anionu Keggina", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.216-217 [ISBN 978-83-60514-24-5]
90. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, D.Lupa, H.Mrowiec, S.Walas "Oxidative dissolution of silver nanoparticles - experimental studies and new theoretical model", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.243
91. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, J.Maciejewska, K.Kubiak, M.Morga, E.Bielańska, B.Napruszewska "Preparatyka mono- oraz multiwarstw nanocząstek koloidalnych do zastosowań katalitycznych, analitycznych i biobójczych", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.39-40 [ISBN 978-83-60514-24-5]
92. M.Oćwieja, A.Węgrzynowicz, J.Maciejewska, P.Michorczyk, Z.Adamczyk "Nanocząstki tlenków żelaza – efektywne katalizatory reakcji konwersji tlenku węgla parą wodną", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.343-344 [ISBN 978-83-60514-24-5]

93. N.Ogrodowicz, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka "Heteropolikwas typu Dawsona $H_6P_2Mo_{18}O_{62}$ jako potencjalny katalizator w reakcjach eteryfikacji", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.110 [ISBN ISBN 978-83-65644-10-7]
94. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bielańska, R.Dula, M.Krzan, B.Napruszewska, M.Nattich-Rak, A.Klimek, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Magnezyt i dolomit jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu przy użyciu nadtlenu wodoru - wpływ aktywacji mechanochemicznej", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.148 [ISBN 978-83-60514-24-5]
95. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bielańska, R.Dula, J.Kryściak-Czerwenka, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu przy pomocy nadtlenu wodoru na katalizatorach hydrotalkitowych o różnym stopniu krystaliczności", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.66 [ISBN 978-83-60514-24-5]
96. K.Onik, M.Gackowski, E.Bielańska, M.Derewiński, B.Sulikowski "Protozeolitic nanoclusters and mesoporous layered materials prepared from them: physicochemical and catalytic properties", Book of Abstracts. 6th Int. Workshop on Layered Materials, Kutná Hora 2016, recorded on a flash memory, Op34
97. K.Onik, M.Gackowski, A.Dziedzicka, E.Bielańska, M.Derewiński, B.Sulikowski "Synthesis of protozeolitic nanoclusters and mesoporous hierarchical materials: physicochemical characteristics and transformations of α -pinene in the liquid phase", Book of Abstracts. 18th Int. Zeolite Conf. Rio de Janeiro 2016, recorded on CD, poster 776
98. Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Żbik, K.Dyła, A.Kania, L.Fiedor, R.van Eldik, G.Stochel "Redox pathways of chlorophylls (trans)metallation", Book of Abstracts. 3rd European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms ECRIM-2016, Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.139
99. H.Pálková, M.Zimowska, Ľ.Jankovič, B.Sulikowski, E.M.Serwicka, J.Madejová "The effect of the organic cation central atom on the thermal stability of organo-montmorillonites", Book of Abstracts. 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016, p.135 [ISBN 978-80-972288-0-4]
100. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, R.Tokarz-Sobieraj "Application of glycerol as green solvent in phenol oxidation catalyzed by sulphonated metallophthalocyanines with hydrogen peroxide", Mater. 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen' (D.Kwiatek, M.Runowski, Z.Hnatejko, S.Lis, eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Medycznego, Poznań 2016, p.98 [ISBN 978-83-7597-292-4]
101. K.Pamin, J.Połtowicz, D.Duraczyńska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka "Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.149 [ISBN 978-83-60514-24-5]

102. K.Pamin, M.Prończuk, S.Basąg, W.Kubiak, Z.Sojka, J.Połtowicz "Synteza nowych organiczno-nieorganicznych hybryd i ich fizykochemiczna charakterystyka", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.288 [ISBN 978-83-60514-24-5]
103. K.Pamin, E.Tabor, S.Basąg, J.Połtowicz "Three generations of cobalt porphyrins as catalysts of cycloalkanes oxidation with molecular oxygen", Mater. 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen' (D.Kwiatek, M.Runowski, Z.Hnatejko, S.Lis, eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Medycznego, Poznań 2016, p.99 [ISBN 978-83-7597-292-4]
104. K.Pamin, N.Wolan, S.Basąg, J.Połtowicz, R.Tokarz-Sobieraj "Glycerol as alternative solvent in phenol oxidation catalyzed by sulphonated metallosalens with hydrogen peroxide", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.198-199 [ISBN 978-83-60514-24-5]
105. P.Panek, P.Zięba, R.Socha, M.Juel, A.Sypień, K.Gawlińska "In-line processing of n+/p and p/p+ junction systems for cheap crystalline Si solar cells production", Book of Abstracts, Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production' (R.Socha, ed.), IkiFP PAN, Krakow 2016, p.8
106. J.Piotrowska, R.Karcz, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, D.Mucha, E.Bielańska, M.Krzan, M.Nattich-Rak, E.M.Serwicka, „Catalytic oxidation of cyclohexanone to ε-caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite-like materials subjected to grinding”, Mater. 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen' (D.Kwiatek, M.Runowski, Z.Hnatejko, S.Lis, eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Medycznego, Poznań 2016, p.100 [ISBN 978-83-7597-292-4]
107. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Nanoencapsulation of neuroprotective drugs and evaluation of their action in human neuroblastoma cell line", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.143
108. W.Płaziński, A.Płazińska, M. Drach "Conformational preferences of acyclic aldo- and ketohexoses and their implication for anomeric equilibria", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.52 [ISBN 978-83-60514-25-2]
109. K.Podgórna, A.Pittermannova, K.Szczepanowicz, J.Cejkova, F.Stepanek, P.Warszyński "Fluorescent labeled alginate microparticles produced by microfluidization method", Book of Abstract. Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016, p.76
110. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, M.Gajdošová, F.Štěpánek, P.Warszyński "Gadolinium alginate nanogels for theranostic applications", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.145-146
111. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, M.Gajdosova, F.Stepanek, P.Warszyński "Polysaccharide gel nanoparticles for controlled drug delivery and theranostic applications", Book of Abstract. Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016, p.156

112. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Jankowska P.Warszyński "Nanoparticles gels for biomedical applications", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.145
113. K.Podgórna, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Formation of polyelectrolytes shells on nanogels surfaces", Book of Abstracts. Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
114. J.Połtowicz, K.Pamin, J.Kryściak-Czerwenka, D.Napruszewska, E.Serwicka-Bahranowska "Heteropolizwiązki jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktonu tlenem molekularnym", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.200 [ISBN 978-83-60514-24-5]
115. A.Popov, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, A.Ramanavicius, A.Ramanavicie "Deposition of silver nanoparticles from suspensions containing tannic acid", Book of Abstracts. 9th Nanoconf. Advance in Bioelectrochemistry and Nanomaterials, Vilnius 2016
116. M.Ruggiero-Mikołajczyk, B.Rivas Murias, F.Rivadulla, G.Mordarski, R.Grabowski, M.Śliwa, A.Żelazny, K.Samson, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Catalytic decomposition of methane on the electrode materials used in solid oxide fuel cells", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.155-156 [ISBN 978-83-60514-24-5]
117. A.Rugor, T.Janeczko, M.Hochołowski, M.Guzik, M.Szaleniec "Selective modifications of steroid and sterols by enzymes from bacterial cholesterol degradation pathway", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.207 [ISBN 978-83-60514-24-5]
118. A.Rugor, M.Tataruch, J.Staroń, M.Guzik, M.Szaleniec "Structure, reactivity and application of steroid C25 dehydrogenase, a molybdenum enzyme hydroxylating sterols and vitamin D3", Book of Abstracts. 8th Int. Congr on Biocatalysis, Hamburg 2016, p.P1-73
119. A.Rugor, A.Wójcik, S.Mordalski, J.Staroń, A.Bojarski, M Szaleniec "The propinquity effect in enzyme catalysis: a case study of steroid C25 dehydrogenase", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.72 [ISBN 978-83-60514-24-5]
120. A.Rugor, A.Wójcik, S. Mordalski, M.Szaleniec "The mechanism of regioselective hydroxylation of sterols by steroid C25 dehydrogenase", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.37 [ISBN 978-83-60514-25-2]
121. A.Rugor, A.Wójcik, M.Szaleniec "Reaction mechanism of regioselective sterol hydroxylation catalyzed by steroid C25 dehydrogenase: quantum chemical study", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.345 [ISBN 978-83-60514-24-5]
122. A.Rugor, A.Wójcik, M.Szaleniec "The Mechanism of Regioselective Hydroxylation of Sterols by Steroid C25 Dehydrogenase", Book of Abstracts. 8th Int. Congr on Biocatalysis, Hamburg 2016, p.L1-9

123. D.Rutkowska-Żbik "Dioxygen Binding and Activation on Cobalt(II) Complexes: DFT Studies", Mater. 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen' (D.Kwiatek, M.Runowski, Z.Hnatejko, S.Lis, eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Medycznego, Poznań 2016, p.103 [ISBN 978-83-7597-292-4]
124. D.Rutkowska-Żbik, M.Buchalska, S.Wojtyła, W.Macyk "From heterogeneous photocatalysts to homogeneous photosensitizers: Ti(IV) complexes as photosensitizers of oxygen. Experimental and computational approach", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.91 [ISBN 978-83-60514-25-2]
125. D.Rutkowska-Żbik, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Mechanistic Studies on Cpd(II) Oxidation of Alcohols", Book of Abstracts. Conf. 'Current Trends in Theoretical Chemistry VII', Wydział Chemii UJ, Kraków, 2016, p. P27 [ISBN 978-83-945177-0-0]
126. D.Rutkowska-Żbik, Ł.Orzeł, M.Świrski, A.Kania, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko, G.Stochel "Czynniki warunkujące transmetalację metaloporfiryn", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.116 [ISBN ISBN 978-83-65644-10-7]
127. M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Oćwieja "Monolayers of silver nanoparticles on polymer micro-spheres", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.87 [ISBN 978-83-60514-24-5]
128. D.Sarkowicz, A.Rafalska-Łasocha, M.Sieklucka, A.Klisińska-Kopacz, M.Matosz, J.de Hoyo-Mendez, M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha "Painting materials used by Henryk Siemiradzki in some of his works", Mater. 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage (A.Rafalska-Łasocha, ed.), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Krakow 2016, pp.105-106 [ISBN 978-83-943754-5-4]
129. E.M.Serwicka "Wpływ wykładów Prof. Bielańskiego na formowanie zainteresowań naukowych – refleksja własna", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.30 [ISBN ISBN 978-83-65644-10-7]
130. R.P.Socha, A.Kędra, M.Zimowska, P.Panek, M.Lipiński, P.Warszyński "Surface chemistry of silicon texturized with HF", Book of Abstracts. 18th European Symp. on Fluorine Chemistry, Kyiv 2016, p.78 [ISBN 978-617-7408-05-4]
131. R.P.Socha, P.Panek "Studies of the Silicate Glasses Formed on the Silicon Surface During in-Line Solar Cell Fabrication", Proc. 8th European Silicon Days, Poznań 2016, p.125 [ISBN 978-83-64864-86-5]
132. R.Socha, P.Panek "Studies of the silicate glass formed on the silicon surface during inline solar cell fabrication", Book of Abstracts, Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production' (R.Socha, ed.), IkiFP PAN, Krakow 2016, p.9

133. Z.Starowicz, A.Kędra, K.Berent, K.Gawlińska, K.Gwóźdź, E.Zielony, G.Kulesza-Matlak, R.P.Socha, K.Drabczyk, M.Lipiński "Experimental and simulation studies of optimal plasmonic structure for the front side configuration of silicon solar cells and photodiodes", Book of Abstracts, Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production' (R.Socha, ed.), IKiFP PAN, Krakow 2016, p.15
134. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Description of Co-NO bond in zeolites: DFT and CASSCF calculations", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.73-74 [ISBN 978-83-60514-24-5]
135. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Theoretical insight into NO activation/deactivation by ammonia modified cobalt centers in zeolites", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.101 [ISBN 978-83-60514-25-2]
136. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Structural and electronic properties of ammonia-modified Co²⁺ centers in zeolites with NO as a probe molecule - theoretical study", Program & Book of Abstracts. 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Hungarian Chemical Society, Budapest 2016, p.xx [ISBN 978-963-9970-56-4]
137. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Large versus small-scale modeling for TM centers in catalysis: is bigger always better ?", Conf. Program & Abstracts. Conf. 'Modeling & Design of Molecular Materials', Trzebnica 2016, p.L7
138. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Theoretical insight into NO activation/deactivation by ammonia modified cobalt centers in zeolites", Conf. Program & Abstracts. Conf. 'Modeling & Design of Molecular Materials', Trzebnica 2016, p.P68B
139. R.Stokłosa, S.Świątek, B.Jachimska "Proces agregacji laktoglobuliny (LGB) w roztworach elektrolitów", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.365 [ISBN 978-83-60988-23-7]
140. B.Sulikowski, J.Datka, K.Tarach, K.Durczyk "Monitoring formation of ultrastable zeolite Y by NMR and IR spectroscopies used *in tandem*", Program & Book of Abstracts. 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Hungarian Chemical Society, Budapest 2016, p.xx [ISBN 978-963-9970-56-4]
141. B.Sulikowski, J.Datka, K.Tarach, K.Durczyk "Ultrastabilization of zeolite Y as monitored by solid-state NMR and IR spectroscopies", Book of Abstracts. 6th Int. Workshop on Layered Materials, Kutná Hora 2016, recorded on a flash memory, Po16
142. M.Szaleniec, J.Heider "Elucidation of factors responsible for enantiospecificity in radical C-C coupling catalyzed by benzylsuccinate synthase", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.346-347 [ISBN 978-83-60514-24-5]
143. M.Szaleniec, J.Heider "Enzymatic C-C bond formation by benzylsuccinate synthases – theoretical study of the mechanism", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.93 [ISBN 978-83-60514-25-2]

144. M.Szaleniec, J.Heider "Elucidation of Factors Responsible for Enantiospecificity in Radical C-C Coupling Catalyzed by Benzylsuccinate Synthase", Book of Abstracts. 8th Int. Congr on Biocatalysis, Hamburg 2016, p.P2-40
145. M.Szaleniec ,A.Rugor, A.Wójcik "Steroid C25 Dehydrogenase, the Bocatalyst for Production of Calcifediol and 25-Hydroxycholesterol", Book of Abstracts. 3rd Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, Warszawa 2016, p.37 [ISBN 978-83-940417-2-4]
146. K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Piotrowski, M.Leśkiewicz, M.Regulska, W.Lasoń, P.Warszyński "Encapsulation of curcumin in polyelectrolyte nanocapsules", Book of Abstract. 24th Int. Conf. on Bioencapsulation, Lisbon 2016, p.138-139
147. K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Piotrowski, J.Staroń, M.Leśkiewicz, M.Regulska, W.Lasoń, P.Warszyński "Encapsulation of curcumin in polyelectrolyte nanocapsules and their neuroprotective activity", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.503
148. K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Pegylated polyelectrolyte multilayer films as the "antifouling" coatings protecting against non-specific proteins adsorption", Book of Abstracts. Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
149. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, A.Karabasz, M.Bzowska, P.Warszyński "Magnetic nanocapsules for delivery of therapeutic compounds", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.504
150. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, M.Piotrowski, P.Warszyński "Synthesis and properties of polyelectrolyte-coated nanocapsules", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.17
151. M.Szczęch, O.Marszałek, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Neuroprotectants-loaded nanoparticles as efficient (brain) drug delivery systems", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.148
152. M.Szczęch, O.Marszałek, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Biopolymer nanoparticles as neuroprotectants-loaded carriers for drug delivery to the brain", Book of Abstract. Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016, p.160
153. M.Szczęch, O.Marszałek, M.Piotrowski, A.Kida, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "The polymer-based nanoparticles as neuroprotectants-loaded carriers for brain drug delivery", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.508
154. M.Szczęch, M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Influence of the surface properties of colloidal poly(ϵ -caprolactone) nanospheres on its stability in bio-fluids", Book of Abstracts. Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
155. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, P.Warszyński "The neuroprotectants-loaded nanoparticles for (brain) drug delivery system", Book of Abstract. 24th Int. Conf. on Bioencapsulation, Lisbon 2016, p.96-97

156. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Plasmid DNA delivery systems based on biopolymeric nanocarriers", Book of Abstract. Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016, p.193
157. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of polyplexes as nanocarriers for plasmid DNA delivery systems", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.8
158. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Biodegradable and non-toxic polymer-based nanocarriers for plasmid DNA delivery", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.147
159. J.Ślusarczyk, K.Szczepanowicz, M.Leskiewicz, M.Regulska, P.Warszyński, W.Lason, A.Basta-Kaim "Evaluation of protective action of polydatin, free form and in nanocapsules, in the hippocampal organotypic cultures treated with lipopolisaccharide", Book of Abstract. 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016, p.20
160. S.Świątek, B.Jachimska "Wpływ pH i siły jonowej na adsorpcję wołowej β -laktoglobuliny na powierzchni złota", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.348 [ISBN 978-83-60514-24-5]
161. S.Świątek, B.Jachimska "Funkcjonalizacja powierzchni złota poprzez adsorpcję wołowej β -laktoglobuliny", Książka Abstraktów. Konf. 'Nanobiomateriały - teoria i praktyka', Toruń 2016, p.34 [ISBN 978-83-231-3565-4]
162. S.Świątek, R.Stokłosa, B.Jachimska "Funkcjonalne warstwy wołowej beta-laktoglobuliny do zastosowań biomedycznych", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.365 [ISBN 978-83-60988-23-7]
163. E.Tabor, S.Basąg, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Kubiak "Katalityczne i elektrochemiczne właściwości μ -oxo porfiryn żelaza", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.166 [ISBN 978-83-60514-24-5]
164. K.Tarach, M.Gackowski, B. Sulikowski, S. Jarczewski, P.Kuśtrowski, J. Datka "Hierarchical zeolites FAU: porosity, acidity and catalytic properties", Program & Book of Abstracts. 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Hungarian Chemical Society, Budapest 2016, p.xx [ISBN 978-963-9970-56-4]
165. K.A.Tarach, K.Gołabek, U.Filek, K.Góra-Marek "Ethanol transformation over 10 MR zeolites: the role of pore architecture", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.167-168 [ISBN 978-83-60514-24-5]
166. K.A.Tarach, J.Tekla, W.Makowski, U.Filek, K.Mlekođaj, V.Girman, M.Choi, K.Góra-Marek "Hierarchical MFI zeolites as the catalysts in alcohol dehydration: the role of microporous environment and secondary mesoporosity", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.311-312 [ISBN 978-83-60514-24-5]

167. 7M.Tataruch, A.Rugor, K.Szymańska, A.Jarzębski, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Witko, M.Szalaniec "Immobilizacja dehydrogenazy C25-steroidowej – testy w reaktorach okresowych i przepływowych", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.351 [ISBN 978-83-60514-24-5]
168. J.Tekla, K.A.Tarach, U.Filek, I.Tarach, K.Góra-Marek "Hierarchiczny zeolit L jako katalizator procesu dehydratacji etanolu", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.251 [ISBN 978-83-60988-23-7]
169. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Interaction of Common Body Proteins with PAMAM dendrimers", Faraday Discussion 'Nanoparticles with Morphological and Functional Anisotropy', Glasgow 2016
170. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Towards modern drug carriers: Immobilization of PAMAM dendrimers on solid support", Książka Abstraktów. Kuźnia Młodych Talentów Akademii Młodych Uczonych PAN, Jabłonna 2016
171. K.Tokarczyk, P.Komorek, I.Kralka, B.Jachimska "Combining surface plasmon resonance and quartz crystal microbalance to determine hydration of protein monolayers", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
172. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, B.Jachimska "Insight into bovine serum albumin adsorption on a hydrophilic silica surface using surface plasmon resonance and molecular dynamics simulation", ARCHIE-West Showcase Workshop, Glasgow2016
173. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, B.Jachimska "Insight into bovine serum albumin adsorption on a hydrophilic silica surface using surface plasmon resonance and molecular dynamics simulation", Nanomaterials for Technology Workshop, Glasgow2016
174. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, B.Jachimska "Surface functionalization with Bovine Serum Albumin (BSA): surface plasmon resonance and molecular dynamics analyses", Faraday Discussion 'Nanoparticles with Morphological and Functional Anisotropy', Glasgow2016
175. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, P.Komorek, B.Jachimska "Towards modern drug carriers: physicochemical characterization of protein using simulation and experiment", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
176. K.Tokarczyk, P.Wolski, T.Pańczyk, B.Jachimska "Physicochemical properties and catalytic applications of PAMAM dendrimers", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.86 [ISBN 978-83-60514-24-5]
177. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, R.Gryboś, M.Wit "Badania teoretyczne aktywności katalitycznej soli heteropolikwasów", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.225-226 [ISBN 978-83-60514-24-5]

178. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, U.Filek "Copper (Cu-HPA) modified heteropolyacids. DFT calculations vs. experimental results", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.95 [ISBN 978-83-60514-25-2]
179. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Heteropolikwasy modyfikowane w pozycji atomu addenda. Obliczenia DFT", Mater. 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej (K.Podolska-Serafin, ed.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2016, p.42 [ISBN ISBN 978-83-65644-10-7]
180. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oxygen activation on Co-HPA systems. DFT study", Mater. 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen' (D.Kwiatek, M.Runowski, Z.Hnatejko, S.Lis, eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Medycznego, Poznań 2016, p.107 [ISBN 978-83-7597-292-4]
181. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, E.Lalik, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Water interaction with mono- and bi-metallic nanoclusters. DFT cluster model study vs. experimental results", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.96 [ISBN 978-83-60514-25-2]
182. B.Tyliszczak, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, S.Kudłacik, K.Bialik-Wąs, A.Drabczyk, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa, M.Krzan "Biodegradable aqueous foams containing various polysaccharides - biofoams for industrial and biomedical applications", Book of Abstracts. 7th Workshop on Green Chemistry and Nanotechnologies in Polymer Chemistry & 4th National Nanotechnology and Polymer Congr., San Jose, Costa Rica 2016, p.36
183. S.P.de Visser, A.S.Faponle, M.G.Quesne, T.Borowski "Quantum mechanics/molecular mechanics studies of cytochrome P450 peroxygenases for the biosynthesis of biofuels", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.20 [ISBN 978-83-60514-25-2]
184. P.Weroński, P.Batys "Szorstkość modelowych monowarstw monodispersyjnych cząstek cylindrycznych", Książka Abstraktów. Sem. 'Samoorganizacja, mikroskopia, spektroskopia', Kraków 2016, p.47
185. A.Wiertel, C.Karaguzel, J.Zawała, O.Sahbaz, K.Małyś " Effect of CTAB concentration on kinetics of bubble attachment and quartz flotation", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016, p.46
186. A.Wiertel, J.Zawała, A.Niecikowska, K.Małyś "Kinetics of bubble coalescence at surfaces of different liquids –influence of external disturbances and size of the liquid films formed", Programme. Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016, p.105
187. A.Wiertel, J.Zawała, K.Małyś, " On mechanism of the three-phase contact formation during bubble collision with quartz surface in CTAB solutions", Mater. 59. Zjazd Naukowy PTChem Poznań 2016 (S.Borysiak, B.Czajka, R.Pietrzak, eds.), PTChem, Warszawa 2016, p.359 [ISBN 978-83-60988-23-7]

188. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, P.Warszyński "Effect of Quantum Dots size on their incorporation into POPC/POPE supported lipid bilayers in dependence of the cushion polyelectrolyte multilayers", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.104
189. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, M.Wasilewska, P.Warszynki "Effect of surface properties of the cushion material on supported lipid bilayer formation", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.20
190. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, S.Zapotoczny, R.von Klitzing, P.Warszyński "Effect of Vesicle Deposition Conditions and Surface Properties of the Cushion Material on Formation of POPC/POPE Supported Lipid Bilayer", Book of Abstracts. Bristol PhD Day, University of Bristol, Bristol 2016, p.12
191. Z.Wojdyła, T.Borowski "DFT study of nitroxygenase activity of manganese quercetin 2,3-dioxygenase", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.98 [ISBN 978-83-60514-25-2]
192. P.Wolski, T.Pańczyk "Drug delivery system based on co-adsorption of doxorubicin and selected dyes in carbon nanotubes functionalized by folic acid. A molecular dynamics study", Mater. 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IKiFP PAN, Kraków 2016, p.99 [ISBN 978-83-60514-25-2]
193. J.Zawała, D.Kosior, P.B.Kowalczyk, J.Drzymała, K.Małyś "Modelling of influence of adsorption layer on kinetics of bubble collisions and attachment to hydrophobic solid", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016, p.39
194. J.Zawała, P.B.Kowalczyk, D.Kosior, J.Drzymała, K.Małyś "A Correlation Between Kinetics of Bubble Attachment to Solids and Flotation Efficiency", Programme. Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016, p.35
195. M.Zimowska, J.Gurgul, L.Matachowski, D.Mucha, K.Łątka "The production of hydrogen from ethanol and water mixtures in nitrogen atmosphere over new Fe_xO_y/MoO₃ systems", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.188-189 [ISBN 978-83-60514-24-5]
196. M.Zimowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, J.Gurgul, R.P.Socha, L.Matachowski, K.Łątka, R.Dula, H.Pálková, J.Kryściak-Czerwenka, R.Karcz, D.Napruszewska "Fe-modified porous clay heterostructures: influence of surface composition and acidity on catalytic properties", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2016, pp.190-191 [ISBN 978-83-60514-24-5]
197. M.Zimowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, J.Gurgul, R.P.Socha, H.Pálková, L.Matachowski, K.Łątka "Influence of surface composition of Fe-doped porous clay heterostructures on catalytic properties", Book of Abstracts. 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016, p.42 [ISBN 978-80-972288-0-4]

198. M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Kryściak-Czerwenka, R.Dula, K.Pamin, K.Bahranowski, Z.Olejniczak, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Acidity of aluminated FSM-16 silicas: a comparative study of direct versus post-synthesis alumination", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.324-325 [ISBN 978-83-60514-24-5]
199. M.Zimowska, H.Pálková, L.Jankovič, D.Duraczyńska, G.Mordarski, J.Madejová, E.M.Serwicka "Organo-clays as supports for immobilization of ruthenium nanoparticles", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, p.354 [ISBN 978-83-60514-24-5]
200. M.Zimowska, H.Pálková, L.Jankovič, D.Duraczyńska, G.Mordarski, J.Madejová, E.M.Serwicka "Organo-clays as supports for immobilization of ruthenium nanoparticles", Book of Abstracts. 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016, p.138 [ISBN 978-80-972288-0-4]
201. A.Żelazny, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero, K.Samson, A.Kornas, D.Duraczyńska, K.Gołębek "Cu/MxOy catalysts for glycerol hydrolysis. Influence of the preparation method and sodium hydroxide addition", Program & Book of Abstracts. 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Hungarian Chemical Society, Budapest 2016, p.95 [ISBN 978-963-9970-56-4]
202. A.Żelazny, R.Grabowski, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Kornas, D.Duraczyńska "Wpływ metody preparatyki katalizatorów Cu/MxOy na właściwości fizykochemiczne i katalityczne w reakcji hydrogenolizy glicerolu", Mater. 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2016, pp.195-196 [ISBN 978-83-60514-24-5]
203. P.Żeliszewska, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, A.Bratak-Skicki "Mechanisms of fibrinogen adsorption on colloid microparticles", Book of Abstracts. 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016, p.133

PRACE W DRUKU

1. M.Elżbiaciak-Wodka, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "Effect of mono- and divalent ions on the formation and permeability of polyelectrolyte multilayer films", J. Electroanal. Chem.,
2. 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,
3. M.Kolasińska-Sojka, M.Włodek, M.Szuwarzynski, S.Kereiche, L.Kovacik, P.Warszyński "Properties of POPC/POPE supported lipid bilayers modified with hydrophobic quantum dots on polyelectrolyte cushions", ACS Nano,
4. M.Kowacz, P.Warszyński "Effect of infrared light on protein interfacial water. Consequences for protein-surface and (surface-immobilized) protein-protein interactions",

5. M.Krzan M "Bubble rising in surfactant solutions – interrelations between local velocities variations and bubble wake evolution", Colloids Surf. A,

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. "XLVIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, XLVIII Polish Annual Conference on Catalysis", 16-18.03.2016, Kraków (U.Filek, B.Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków, 2016, pp. 3465 [ISBN 978-83-60514-24-5]
2. "16th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis", Zakopane, Poland, 19th-23rd June, 2016, (D.Rutkowska-Żbik, ed.), IkiFP PAN Kraków, 2016, pp.104 [ISBN 978-83-60514-25-2]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY UDZIELONE

1. Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Oćwieja "Sposób wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra oraz zastosowanie stabilnych suspensji nanocząstek srebra do celów biobójczych", Patent RP, PL 224713 (15.06.2016)
2. E.Serwicka-Bahranowska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula "Sposób wytwarzania tlenkowego katalizatora miedziowo-manganowego na nośniku monolitycznym do utleniania zanieczyszczeń, zwłaszcza organicznych, w procesach oczyszczania gazów", Patent RP, PL 224716 (23.06.2016)
3. E.Serwicka-Bahranowska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula "Sposób wytwarzania monolitycznego tlenkowego katalizatora manganowo-miedziowego domieszkowanego cyrkonem i cerem do utleniania zanieczyszczeń, zwłaszcza organicznych w procesach oczyszczania gazów", Patent RP, PL 224715 (23.06.2016)
4. M.Szaleniec, M.Tataruch, J.Bryjak, P.Nowak "Sposób otrzymywania chiralnie czystych alkoholi alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych oraz układ reaktorowy do realizacji tego sposobu", Patent RP, PL 225172 (15.09.2016)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

1. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, J.Maciejewska-Prończuk "Sposób modyfikowania powierzchni stałych o ujemnym ładunku powierzchniowym, zwłaszcza powierzchni sensorów mikrowag kwarcowych, dodatnio naładowanymi nanocząstkami złota", zgłoszenie patentowe RP, P.419878 (19.12.2016)
2. T.J.Brunchwiler, B.Burg, R.Dixon, H.Kristiansen, P.Warszyński, J.Zuercher " Bridging Arrangement, Microelectronic component and Method for manufacturing A Bridging Arrangement ", zgłoszenie patentowe UK GB 2531760; zgłoszenie patentowe USA, US 2016126202

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH 2016

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z.Adamczyk "Mechanisms of noble metal monolayer formation at solid substrates", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
2. E.Błasiak, S.Łukasiewicz, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, M.Dziedzicka-Wasylewska "Biocompatible polymeric nanoparticles as promising candidates for drug delivery", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
3. Ł.Bratasz, R.Kozłowski, M.Łukomski "HERIE – a decision-supporting tool based on quantitative assessment of damage risk", Seminar & Symp. 'The Mechanics of Art Materials and its Future in Heritage Science', The Smithsonian Institution, Washington 2016
4. A.Drelinkiewicz, E.Lalik, R.Kosydar "Efekty termiczne reakcji z udziałem wodoru; wyzwanie dla technologii OZE", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
5. B.Jachimska, K.Tokarczyk "Dendrimers as a platform for designing biologically active carriers", Nanomaterials for Technology Workshop, Glasgow 2016
6. D.Jantas, M.Piotrowski, M.Leśkiewicz, M.Regulska, J.Staroń, P.Warszyński, W.Lasoń, K.Szczepanowicz "Neuroprotective activity of (bio)polyelectrolyte-coated nanocapsules containing curcumin", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
7. M.Kowacz, M.Marchel, L. Juknaitė, J.M.S.S.Esperança, M.J.Romão, A.L.Carvalho, L.P.N.Rebelo, P.Warszyński "Effect of infrared light on protein interfacial water. Consequences for protein self-assembly and protein-surface intercation", 11th Conf. on Physics, Chemistry and Biology of Water, Sofia 2016
8. M.Kowacz, M.Marchel, L.Juknaitė, A.Mukhopadhyay, A.L.Carvalho, J.M.S.S.Esperança, M.J.Romão, L.P.N.Rebelo "Ionic liquids - water interplay in protein crystallization. From additives to nucleants to...", 16th Int. Conf. on Crystallization of Biological Macromolecules, Prague 2016
9. R.Kozłowski "Shared understanding facilitates decision making", Global Colloquium of University Presidents 'Preservation of Cultural Heritage: Challenges and Strategies', New Haven 2016
10. R.Kozłowski, A.Kupczak, Ł.Lasyk, A.Działo, Ł.Bratasz, M.Łukomski "HERIE - a web-based software for assessing risk of climate-induced damage to painted wood", Conf. 'Wood Science and Technology II, Microclimates for Panel Paintings', SRAL Art conservation and research, Maastricht 2016
11. K.Malysa "On importance of thin liquid films in the colliding bubble attachment to solid surfaces of different hydrophobicity – a review", Mineral Engineering Conf. MEC2016, Swieradów-Zdrój 2016

12. A.Micek-Ilnicka "Heteropolizwiązki – ich osobliwe właściwości fizykochemiczne, katalityczne i fotokatalityczne", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
13. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Colloid nanoparticles and carbon nanotubes. What can we learn about their biomedical application from molecular dynamics simulations", Conf. 'Physics of Liquid Matter: Modern Problems PLMMP-2016', Kyiv 2016
14. E.M.Serwicka "Wpływ wykładów Prof. Bielańskiego na formowanie zainteresowań naukowych – refleksja własna", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
15. Z.Starowicz, H.Kazimierczak, R.P.Socha, K.Berent, M.Lipiński "The effect of the process parameters on microstructure of silver nanoparticles photochemically deposited on titanium dioxide", 2016 E-MRS Spring Meeting, Lille 2016
16. M.Szaleniec, A.Rugor, A.Wójcik "Steroid C25 Dehydrogenase, the Biocatalyst for Production of Calcifediol and 25-Hydroxycholesterol", 3rd Symp. on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, Warszawa 2016
17. M.Szaleniec, M.Witko, T.Borowski, J.Heider "Is the theoretical modeling a reliable tool for studying the reaction mechanisms of enzymes?", 5th Int. Conf. of Biophysics Students, Kraków 2106
18. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, M.Piotrowski, P.Warszyński "Synthesis and properties of polyelectrolyte-coated nanocapsules", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
19. J.Ślusarczyk, K.Szczepanowicz, M.Leskiewicz, M.Regulska, P.Warszyński, W.Lason, A.Basta-Kaim "Evaluation of protective action of polydatin, free form and in nanocapsules, in the hippocampal organotypic cultures treated with lipopolisaccharide", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
20. S.P.de Visser, A.S.Faponle, M.G.Quesne, T.Borowski "Quantum mechanics/molecular mechanics studies of cytochrome P450 peroxygenases for the biosynthesis of biofuels", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
21. M.Witko, P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, A.Micek-Ilnicka, U.Filek "Catalytic properties of heteropolyacids: theory vs. experiment", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016

REFERATY I KOMUNIKATY

1. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Weselucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Ewolucja katalitycznych warstw tlenkowych aktywnych w bezpośrednim rozkładzie NO na stali austenitycznej AISI 321 pod wpływem czynników zewnętrznych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
2. T.Borowski, A.Miłaczewska, Z.Wojdyła "Oxidative C-C bond cleavage by two metalloenzymes and one synthetic complex", Conf. 'Current Trends in Theoretical Chemistry VII', Kraków 2016

3. A.Bratak-Skicki, M.Delcroix, A.van der Straeten, C.Dupont-Gillain "Tunable protein immobilization at interfaces based on polyelectrolyte-protein interactions", Conf. Biointerfaces International 2016, Zurich 2016
4. A.Bratak-Skicki, C.Dupont-Gillain "Selective protein adsorption on stimuli-responsive brushes", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
5. E.Brocławik, T.Borowski, M.Radoń, A.Stępniewski "Stany spinowe i ich znaczenie dla katalizy na centrach metali przejściowych w enzymach i nie tylko", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
6. E.Brocławik, A.Stępniewski, M.Radoń, K.Góra-Marek "High-level small-scale or periodic DFT modeling for TM centers in zeolites?", Conf. 'Current Trends in Theoretical Chemistry VII', Kraków, 2016
7. M.Duda, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Analiza symetrii ornamentów w polichromiach w kościele mriackim i kościele Franciszkanów w Krakowie", 58. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2016
8. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, E.Bielańska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska "Uniwersalny katalizator typu Ru/SBA-15 do uwodornienia grup C=O, C=C i C≡C", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
9. M.Gackowski, E.Bielańska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, J.Kryściak-Czerwenka, B.Sulikowski, M.Derewiński "Silica monoliths with deposited zeolite nanoparticles as model, continuous-flow microreactors", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
10. M.Gackowski, K.Tarach, Ł.Kuterasiński, J.Podobiński, S.Jarczewski, B.Sulikowski, P.Kuśtrowski, J.Datka "Hierarchiczne zeolity Y – materiały o wysokiej kwasowości, porowatości i aktywności katalitycznej", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
11. A.Kędra, R.Socha, Z.Starowicz, M.Zimowska, M.Lipiński, P.Warszyński "Synthesis and characterization of organic and inorganic perovskites for application in solar cells", Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production', Krakow 2016
12. A.Kędra, R.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Zimowska, Z.Starowicz, M.Lipiński, P.Warszyński "Synteza i charakteryzacja konwerterów światła opartych na strukturze perowskitu", 7. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika - Perspektywy Rozwoju', Świeradów-Zdrój 2016
13. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, G.J.M.Koper, P.Warszyński "Permeability of alginate containing multilayer films cross-linked by multivalent cations", Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
14. M.Kołodziej, R.Kosydar, E.Lalik, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Activity/selectivity control in Pd/H_xMoO₃ catalyzed cinnamaldehyde and furfural hydrogenation", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016

15. A.Kornas, R.Grabowski, K.Samson, M.Śliwa, D.Rutkowska-Żbik, A.Żelazny, M.Ruggiero "Dimethyl ether synthesis through CO₂ hydrogenation over hybrid catalysts: effects of preparation methods and heteropoly acids", 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Siofok 2016
16. A.Koziol-Rachwal, T.Ślęzak, B.Matlak, K.Matlak, J. Korecki "Growth and magnetic properties of ultrathin epitaxial FeO films and Fe/FeO bilayers on MgO(001)", 13th Joint MMM-Intermag Conf., San Diego CA 2016
17. Z.Kraśńska, G.Pathak, L.Szyk-Warszyńska, D.Cakara "Structure investigation of pedot.pss thin films", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
18. A.Krawczyk, R.Socha, Z.Starowicz, M.Zimowska, M.Lipiński, P.Warszyński "Synthesis and characterization of organic and inorganic perovskites for application in solar cells", Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production', Krakow 2016
19. M.Krzan "Influence of bubble wake, its size and shape on the bubble local and terminal velocities", Conf. EuFoam 2016, Dublin 2016
20. M.Krzan "Influence of bubble wake development on bubble motion in surfactant solutions", Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016
21. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, S.Kudłacik, K.Bialik-Wąs, A.Drabczyk, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, B.Tyliszczak, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa "Piany ciekłe wytworzone na bazie mieszanin polisacharydów do zastosowań kosmetycznych i biomedycznych", Konf. 'Nowoczesna Kosmetologia – od Nauki od Biznesu', Kraków 2016
22. A.Kupczak, Ł.Lasyk, A.Działo, Ł.Bratasz, M.Łukomski, R.Kozłowski "HERIe - a web-based software for assessing risk of physical damage of heritage objects vulnerable to climate fluctuations", ICOM-CC Joint Interim Meeting 'Physical Issues in the Conservation of Paintings: Monitoring, Documenting and Treatment', Paris 2016
23. A.Kupczak, A.Sadłowska-Sałęga, L.Krzemień, J.Radoń, R.Kozłowski "Modelling impact of collections on indoor climate and energy consumption in libraries and archives", 2nd Int. Conf. on Energy Efficiency and Comfort of Historic Buildings, Brussels 2016
24. Ł.Kuterasiński, B.Sulikowski, J.Kryściak-Czerwenka, A.Dziedzicka, K.Durczyk, U.Olsbye, G.Szymański, E.Włoch, E.Bielańska, M.Derewiński "Protonowe centra kwasowe w borokrzemianach o strukturze typu MFI", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
25. E.Lalik, G.Mordarski, R.P.Socha, A.Drelinkiewicz "Oscillatory mechanism of solid/gas interaction in the palladium/hydrogen system", Int. Discussion on hydrogen energy and applications IDHEA 2016, Nantes 2016
26. D.Lupa, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas "Kinetyka oksydacyjnego roztwarzania nanocząstek srebra", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016

27. D.Lupa, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, H.Mrowiec, S.Walas "Mechanisms of oxidative dissolution of silver nanoparticles", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
28. J.Maciejewska, K.Kubiak, M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Kinetics of gold nanoparticle deposition on PAH-modified gold substrate", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
29. J.Maciejewska-Prończuk, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Morga "Monowarstwy nanocząstek złota o kontrolowanej strukturze i właściwościach", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
30. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Mechanizmy osadzania nanocząstek srebra na powierzchni nośników koloidalnych", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
31. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Catalytic properties of modified heteropolyacids. DFT cluster model study", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
32. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, J.Maciejewska, K.Kubiak, M.Morga, E.Bielańska, B.Napruszewska "Preparatyka mono- oraz multiwarstw nanocząstek koloidalnych do zastosowań katalitycznych, analitycznych i biobójczych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
33. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bielańska, R.Dula, J.Kryściak-Czerwenka, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Utlenianie cykloheksanonu do ϵ -kaprolaktanu przy pomocy nadtlenu wodoru na katalizatorach hydrotalkitowych o różnym stopniu krystaliczności", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
34. K.Onik, M.Gackowski, E.Bielańska, M.Derewiński, B.Sulikowski "Protozeolitic nanoclusters and mesoporous layered materials prepared from them: physicochemical and catalytic properties", 6th Int. Workshop on Layered Materials, Kutná Hora 2016
35. A.Mińczewska, T.Borowski "Obliczenia metodą hybrydową QM/MM – wgląd w przebieg reakcji katalitycznej metaloenzymu ARD", Dzień Otwarty Cyfronet AGH, Kraków 2016
36. P.Panek, P.Zięba, R.Socha, M.Juel, A.Sypień, K.Gawlińska "In-line processing of n+/p and p/p+ junction systems for cheap crystalline Si solar cells production", Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production', Krakow 2016
37. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Carbon nanotubes as pH controlled drugs nanocontainers. Insights from molecular dynamics simulation", World Conf. on Carbon 'Common fundamentals, remarkably versatile applications CARBON 2016', State College PA 2016
38. T.Pańczyk, P.Wolski, Ł.Kończak "A few strategies of using carbon nanotubes as smart drug delivery systems. Insights into mechanisms of action from molecular dynamics simulation", 14th Annual Congr. of International Drug Discovery Science and Technology IDDST-South Korea 2016, Gyeonggi 2016
39. W.Płaziński "Activation of the toggle switch and dynamic network of the β 2-adrenergic receptor", 8th Conservatory of Medicinal Chemistry, Lublin 2016

40. W. Płaziński " Ring inversion properties of hexopyranoses: from force field parametrization to the interplay between ring shape and glycosidic linkage conformation", 8th Conversatory of Medicinal Chemistry, Lublin 2016
41. W. Płaziński " Ring inversion properties of hexopyranoses: from force field parametrization to studies on the interplay between ring shape and glycosidic linkage conformation", 28th Int. Carbohydrate Symp., New Orleans 2016
42. W. Płaziński, A. Płazińska, M. Drach "Conformational preferences of acyclic aldo- and ketohexoses and their implication for anomeric equilibria", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
43. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, M. Piotrowski, M. Gajdosova, F. Stepanek, P. Warszyński "Polysaccharide gel nanoparticles for controlled drug delivery and theranostic applications", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016
44. A. Rugor "Oksydoreduktazy ze *Sterolibacterium denitrificans* jako biokatalizatory do reakcji utleniania pochodnych steroidowych", Dzień Otwarty Cyfronet AGH, Kraków 2016
45. A. Rugor, A. Wójcik, S. Mordalski, J. Staroń, A. Bojarski, M. Szaleniec "The propinquity effect in enzyme catalysis: a case study of steroid C25 dehydrogenase", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
46. A. Rugor, A. Wójcik, S. Mordalski, M. Szaleniec "The mechanism of regioselective hydroxylation of sterols by steroid C25 dehydrogenase", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
47. A. Rugor, A. Wójcik, M. Szaleniec "The Mechanism of Regioselective Hydroxylation of Sterols by Steroid C25 Dehydrogenase", 8th Int. Congr on Biocatalysis, Hamburg 2016
48. R. Socha "Badania powierzchni krzemu fotowoltaicznego po procesie dotowania z ciekłych źródeł", 7. Symp. 'Fotowoltaika i Transparentna Elektronika - Perspektywy Rozwoju', Świeradów-Zdrój 2016
49. R.P. Socha, A. Kędra, M. Zimowska, P. Panek, M. Lipiński, P. Warszyński "Surface chemistry of silicon texturized with HF", 18th European Symp. on Fluorine Chemistry, Kyiv 2016
50. R. Socha, P. Panek "Studies of the silicate glass formed on the silicon surface during inline solar cell fabrication", Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production', Krakow 2016
51. R.P. Socha, P. Panek "Studies of the Silicate Glasses Formed on the Silicon Surface During in-Line Solar Cell Fabrication", 8th European Silicon Days, Poznań 2016
52. Z. Starowicz, A. Kędra, K. Berent, K. Gawlińska, K. Gwóźdź, E. Zielony, G. Kulesza-Matlak, R.P. Socha, K. Drabczyk, M. Lipiński "Experimental and simulation studies of optimal plasmonic structure for the front side configuration of silicon solar cells and photodiodes", Int. Workshop 'Materials and methods for cost-effective solar cell production', Krakow 2016

53. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Description of Co-NO bond in zeolites: DFT and CASSCF calculations", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
54. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Large versus small-scale modeling for TM centers in catalysis: is bigger always better ?", Conf. 'Modeling & Design of Molecular Materials', Trzebnica 2016
55. M.Strojecki, A.Mleczkowska, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Particle deposition and sources in the indoor environment of historic churches", 12th Int. Conf. 'Indoor Air Quality - in Heritage and Historic Environments', Birmingham 2016
56. M.Szaleniec "Biokataliza i mikrobiologia dla różnych dziedzin przemysłu", Dzień Otwarty Klastra Life Science, Kraków 2016
57. M.Szaleniec, J.Heider "Elucidation of Factors Responsible for Enantiospecificity in Radical C-C Coupling Catalyzed by Benzylsuccinate Synthase", 8th Int. Congr on Biocatalysis, Hamburg 2016
58. M.Szczęch, O.Marszałek, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Biopolymer nanoparticles as neuroprotectants-loaded carriers for drug delivery to the brain", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016
59. S.Świątek, B.Jachimska "Funkcjonalizacja powierzchni złota poprzez adsorpcję wołowej β -laktoglobuliny", Konf. 'Nanobiomateriały - teoria i praktyka', Toruń 2016
60. K.Tarach, M.Gackowski, B. Sulikowski, S. Jarczewski, P.Kuśtrowski, J. Datka "Hierarchical zeolites FAU: porosity, acidity and catalytic properties", 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Siófok 2016
61. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Towards modern drug carriers: Immobilization of PAMAM dendrimers on solid support", Kuźnia Młodych Talentów Akademii Młodych Uczonych PAN, Jabłonna 2016
62. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Heteropolikwasy modyfikowane w pozycji atomu addenda. Obliczenia DFT", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
63. P.Warszyński "Nanoparticulate delivery systems for therapies against neurodegenerative diseases", Conf. of Polish Norwegian Research Programme 'Together for Innovation in Health', Krakow 2016
64. A.Wiertel, C.Karaguzel, J.Zawała, O.Sahbaz, K.Małyś " Effect of CTAB concentration on kinetics of bubble attachment and quartz flotation", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
65. A.Wiertel, J.Zawała, K.Małyś, " On mechanism of the three-phase contact formation during bubble collision with quartz surface in CTAB solutions", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016

66. M.Witko "Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS", Polish-French Scientific Workshop on Life Sciences, Kraków 2016
67. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, P.Warszyński "Effect of Quantum Dots size on their incorporation into POPC/POPE supported lipid bilayers in dependence of the cushion polyelectrolyte multilayers", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
68. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, S.Zapotoczny, R.von Klitzing, P.Warszyński "Effect of Vesicle Deposition Conditions and Surface Properties of the Cushion Material on Formation of POPC/POPE Supported Lipid Bilayer", Bristol PhD Day, University of Bristol, Bristol 2016
69. J.Zawała, D.Kosior, P.B.Kowalczyk, J.Drzymała, K.Małysa "Modelling of influence of adsorption layer on kinetics of bubble collisions and attachment to hydrophobic solid", 11th School for Postgraduate Students 'Interfacial Phenomena in Theory and Practice', Sudomie 2016
70. J.Zawała, P.B.Kowalczyk, D.Kosior, J.Drzymała, K.Małysa "A Correlation Between Kinetics of Bubble Attachment to Solids and Flotation Efficiency", Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016
71. M.Zimowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, J.Gurgul, R.P.Socha, H.Pálková, L.Matachowski, K.Łątka "Influence of surface composition of Fe-doped porous clay heterostructures on catalytic properties", 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016
72. A.Żelazny, R.Grabowski, M.Śliwa, M.Ruggiero, K.Samson, A.Kornas, D.Duraczyńska, K.Gołabek "Cu/MxOy catalysts for glycerol hydrogenolysis. Influence of the preparation method and sodium hydroxide addition", 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Siofok 2016
73. P.Żeliszewska, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, A.Brątek-Skicki "Mechanisms of fibrinogen adsorption on colloid microparticles", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016

POSTERY

1. A.Barbasz, B.Kreczmer, M.Oćwieja, M.Filek "Changes of biochemical parameters of wheat calli cells exposed to silver nanoparticles of various surface properties", 10. Ogólnopolska Konf. 'Kultury in vitro w fizjologii roślin', Kraków 2016
2. P.Batys, M.Nosek, M.Skoczek, P.Weroński "Voltammetric studies of thin films transport properties", 16th Int. Conf. on Organized Molecular Films, Helsinki 2016
3. P.Batys, R.Zhang, M.Sammalkorpi "Understanding Hydrated Polyelectrolyte Complexes and Multilayers via Molecular Simulations", 16th Int. Conf. on Organized Molecular Films, Helsinki 2016

4. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Wpływ składu chemicznego austenitycznej stali Cr-Ni AISI 321 na morfologię oraz skład chemiczny i fazowy powierzchniowych części katalitycznych warstw tlenkowych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
5. E.Bielańska, J.Camra, M.Najbar, A.Wesełucha-Birczyńska, T.Wilkosz "Wpływ redukcji wodorem na skład chemiczny i fazowy katalitycznych warstw tlenkowych na folii ze stali austenitycznej Cr-Ni AISI 321", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
6. T.Borowski, A.Miłaczevska, Z.Wojdyła "Oxidative C-C bond cleavage by two metalloenzymes and one synthetic complex", 5th Scientific Workshop ECOSTBio, Kraków 2016
7. A.Bożek, P.Serda, W.Łasocha "Polioksomolibdeniany pochodnych aniliny", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
8. B.Bożek, P.Serda, W.Łasocha "Polimolibdeniany metylo pochodnych aniliny", 58. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2016
9. A.Bratak-Skicki, C.Dupont-Gillain "Ionic and pH-dependent protein adsorption on stimuli-responsive polymer brushes", 1st UCL Interplatform Workshop on Nanotechnology: From Materials to Devices, Louvain-la-Neuve 2016
10. A.Bratak-Skicki, C.Dupont-Gillain "Protein adsorption on mixed PEO/PAA polymer brushes- role of pH and ionic strength", Ph.D. Student's Day, Louvain-la-Neuve 2016
11. A.Bratak-Skicki, C.Dupont-Gillain "Smart Polymeric Materials for Biomedical Applications", Euro Science Open Forum ESOF, Manchester 2016
12. Z.Brzązek-Mucha, D.Mucha "Chemical, structural, and morphological characterization of metallic objects for forensic purposes", 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow 2016
13. K.Brylewska, K.A.Tarach, W.Mozgawa, Z.Olejniczak, U.Filek, K.Góra-Marek "Hierarchiczny ferrieryt: właściwości teksturalno/kwasowe w kontekście zastosowań katalitycznych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
14. M.Chojecki, S.Yourdkhani, D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "B₄₀ molecule as a nanocontainer", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
15. A.Drelinkiewicz, E.Bielańska, M.Góral-Kurbiel, J.Gurgul, M.Kołodziej, R.Kosydar, T.Szumelda "Controlling nanostructure of bimetallic Pd-M (M = Au, Ir, Pt, Ru) catalysts prepared by the reverse "water-in-oil" microemulsion method", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
16. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "DFT mechanistic studies on Compound II oxidation of alcohols and aldehydes", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016

17. P.Dubiela, L.R.Offermann, M.Bublin, M.L.Perdue, S.Pfeifer, T.Borowski, M. Chruszcz, K.Hoffmann-Sommergruber "Structural and functional characterization of the hazelnut allergen Cor a 8", EAACI Winter School of Immunology 'Basic Immunology Research in Allergy and Clinical Immunology', Cortina d'Ampezzo 2016
18. D.Duraczyńska, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Toward efficient and versatile catalysts for liquid phase hydrogenation of the C=O, C=C and C≡C bonds under mild conditions", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
19. D.Duraczyńska, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka, R.M.Kosydar "Ru/SBA-15 catalysts for efficient liquid phase hydrogenation of acetol to 1,2-propanediol under mild conditions", 1st French Conf. on Catalysis, Frejus 2016
20. D.Duraczyńska, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Efficient and versatile Ru/SBA-15 catalysts for liquid phase hydrogenation of C=O, C-C double- and triple-bonds under mild conditions", 1st French Conf. on Catalysis, Frejus 2016
21. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Michalik-Zym, B.D.Napruszewska, E.Bielańska, R.P.Socha, L.Lityńska-Dobrzyńska "Uwodornienie ketonów na przykładzie acetolu i 2-butanonu w obecności katalizatorów rutenowych naniesionych na mezoporowatą krzemionkę SBA-15", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
22. M.Gackowski, Ł.Kuterasiński, E.Bielańska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, B.Sulikowski, M.Derewiński "Silica monoliths with deposited protozeolitic nanoparticles as effective microreactors for α -pinene isomerization", 18th Int. Zeolite Conf. Rio de Janeiro 2016
23. M.Gosselin, C.Gaudreault, H.Rahma, J.Lemay, D.Groleau, H.Cabana, V.Kumar, M.Tataruch "Hollow mesoporous silica microspheres. Potential for Increased Process Productivity", World Congr. on Industrial Biotechnology BIO 2016, San Diego CA 2016
24. A.González Guillén, K.Luberda-Durnaś, M.Oszajca, W.Łasocha "Synthesis and Characterization of a New Family of Organic-Inorganic Hybrid Layered Materials Based on Metal Sulphates and Aromatic Diamines (diamine)_x MSO₄, (M=Cd, Zn; x=1/2, 1)", 58 58. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2016
25. M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, J.Gurgul, M.Ruggiero, G.Mordarski, L.Lityńska-Dobrzyńska, A.Drelinkiewicz "Determination of optimal metal composition in carbon supported Pd-Pt catalysts for oxygen reduction reaction", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
26. M.Grzesiak-Nowak, A.Rafalska-Łasocha, A.Klisińska-Kopacz, E.Cieślak, W.Łasocha "Preliminary studies of Katarzyna Kobro's gypsum sculptures", 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow 2016

27. A.Grzesik, M.Oszajca, M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha "Evaluation of various scientific techniques applied to investigations of ancient metal objects", 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow 2016
28. E.Jarek, D.Białek-Kostecka, Z.Kaszowska, M.Kot, J.Bagniuk, A.Forczek-Sajdak "Influence of synthetic polymers (vinyl and acrylic resins) used in conservation of mural painting on physicochemical properties of paint layers", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
29. I.Kamińska-Borek, L.Szyk-Warszyńska, J.Ortyl, R.Popielarz "Fluorescent molecular probes as a valuable tool in monitoring of photopolymerization kinetic and visualization of polymer network formation", 4th European Symposium of Photopolymer Science ESPS, Leipzig 2016
30. A.Karabasz, K.Szczepanowicz, J.Bereta, M.Bzowska "In vitro analysis of cytotoxic effect of polyelectrolyte nanocapsules", 1st Int. Conf. InterNanoPoland 2016, Katowice 2016
31. R.Karcz, B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, J.Olszówka, R.Dula, D.Duraczyńska, E.M.Serwicka "atalizatory magnezowe na nośniku SBA-15 jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
32. Z.Kaszowska, A.Sajdak, D.Białek-Kostecka, E.Jarek, M.Kot, J.Bagniuk, M.Walczak "The impact of the process of wall painting consolidation using synthetic materials on the properties of paint layers", 2nd Int. Conf. on Art & Archaeology 2016 'Art and Archaeology Strengthened by Measurement Techniques', Jerusalem 2016
33. A.Kędra, M.Mosiąlek, E.Bielańska, M.Tatko "Catalysis of oxygen reduction at $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ - $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ composite cathode for solid oxide fuel cell", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
34. A.Kędra, R.P.Socha, L.Szyk-Warszyńska, M.Zimowska, K.Szczepanowicz, Z.Starowicz, M.Lipiński, P.Warszyński "Interaction of plasmonic particles with light converters", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
35. A.Kida, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Micele polimerowe jako nośniki leków neuroprotektynnych", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
36. A.Kirpsza, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A.Micek-Ilnicka "inetyka i mechanizm dehydratacji izopropanolu na katalizatorach typu heteropolikwas-nośnik", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
37. A.Klimek, A.Gaweł, A.Tomczyk, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Sorption of carbon dioxide on Ti-, Zr- and [Ti,Zr]-pillared montmorillonites", 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016
38. M.Kołodziej, E.Lalik, T.Szumelda, J.Gurgul, D.Duraczynska, A.Drelinkiewicz "A role of hydrogen bronzes in the MoO₃ and WO₃ supported Pd catalysts in activity/selectivity control for hydrogenation of furfural and cinnamaldehyde", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016

39. M.Kołodziej, E.Lalik, T.Szumelda, R.Kosydar, J.Gurgul, D.Duraczynska, A.Drelinkiewicz "A role of H_xMoO_3 (H_xWO_3) in the Pd catalysts in activity/selectivity control for hydrogenation of unsaturated aldehydes", 11th Int. Congr. on Catalysis and Fine Chemicals CAFC-11, Lyon 2016
40. M.Kołodziej, E.Lalik, T.Szumelda, R.Kosydar, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "A role of hydrogen bronzes in the MoO_3 and WO_3 supported Pd catalysts in activity/selectivity control for hydrogenation of furfural and cinnamaldehyde", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
41. P.Komorek, I.Kralka, K.Tokarczyk, B. Jachimiska "Stopień hydratacji samoorganizujących się warstw białkowych na powierzchni złota", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
42. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Molecular Dynamics Simulations of Drug Delivery Systems based on Carbon Nanotubes and Colloidal Nanoparticles", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
43. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Analysis of size effects in interaction of carbon nanotubes with functionalized gold nanoparticles. A molecular dynamics study", 17th Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes and low-dimensional materials NT16, Vienna 2016
44. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Effects of intermolecular forces on the stability of carbon nanotubes capped by gold nanoparticles at acidic pH. A molecular dynamics study", World Conf. on Carbon 'Common fundamentals, remarkably versatile applications CARBON 2016', State College PA 2016
45. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Stability of carbon nanotubes capped by gold nanoparticles at acidic pH. A molecular dynamics study", 14th Annual Congr. of International Drug Discovery Science and Technology IDDST-South Korea 2016, Gyeonggi 2016
46. Ł.Kończak, T.Pańczyk "Intermolecular Interactions between Carbon Nanotubes and Colloidal Nanoparticles. A Molecular Dynamics Study", Conf. 'Physics of Liquid Matter: Modern Problems PLMMP-2016', Kyiv 2016
47. A.Kornas, R.Grabowski, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero, A.Żelazny "Synteza dimetyloeteru z mieszaniny CO_2+H_2 na katalizatorach hybrydowych - wpływ metody syntezy i dodatku heteropolikwasów na aktywność katalityczną", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
48. A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "DFT Insights on H_2 and CO_2 adsorption on small size Cu_n ($n = 7, 13$) clusters", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
49. A.Kornas, D.Rutkowska-Zbik "Oddziaływanie klastra Cu_7 i Cu_{13} z cząsteczkami wodoru i dwutlenku węgla - obliczenia DFT", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
50. R.Kosydar, M.Kołodziej, E.Lalik, J.Gurgul, D.Duraczyńska, A.Drelinkiewicz "Activity and selectivity control in hydrogenation of furfural and cinnamaldehyde on Mo- and W-oxides supported Pd catalysts", 1st French Conf. on Catalysis, Frejus 2016

51. R.Kosydar, M.Kołodziej, D.Macina, D.Duraczyńska, L.Chmielarz, A.Drelinkiewicz "Catalytic hydrogenation of furfural towards aliphatic alcohols. A role of support properties", 11th Int. Congr. on Catalysis and Fine Chemicals CAFC-11, Lyon 2016
52. R.Kosydar, S.Scirè, A.Drelinkiewicz, R.Fiorenza, E.Bielańska, M.Krzan, J.Gurgul, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Hydrolysis of sodium borohydride and ammonia borane on carbon supported Ru, Pt and Ru-Pt catalysts", 1st French Conf. on Catalysis, Frejus 2016
53. M.Kozieł, M.Oszajca, W.Łasocha "Program 'POWDER DIFFRACTION TOOLBOX' - nowe narzędzie do wspomagania pracy chemika-krystalografa", 58. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2016
54. I.Kralka, P.Komorek, K.Tokarczyk, B.Jachimska "Określenie stopnia hydratacji warstw białkowych z zastosowaniem metod MP-SPR i QCM-D", Konf. 'Nanobiomateriały - teoria i praktyka', Toruń 2016
55. I.Kralka, K.Tokarczyk, R.Socha, B.Jachimska "Badanie porównawcze zachowania albuminy z surowicy bydłowej (BSA) na powierzchni złota z zastosowaniem metod MP-SPR i QCM-D", Forum of Diploma Thesis 'Horizons of Science', Jagiellonian University, Krakow 2016
56. I.Kralka, K.Tokarczyk, R.Socha, B.Jachimska "Badanie porównawcze zachowania albuminy z surowicy bydłowej (BSA) na powierzchni złota z zastosowaniem metod MP-SPR i QCM-D", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
57. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte films with the „antifouling” properties", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
58. M.Krzan "Influence of n-alcohol chain length on local and terminal velocities of rising bubbles", Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016
59. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa "Stable and biodegradable aqueous foams for industrial or biomedical applications", Conf. EuFoam 2016, Dublin 2016
60. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa "Biodegradable aqueous foams based on xanthan and gellan gums", Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016
61. L.Krzemień, M.Łukomski, M.Strojecki "The effect of growth ring structure on the response of wood subjected to changing climate conditions", 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow 2016
62. N.Kwiatek, J.Wojas, E.Madej, K.Freindl, N.Spiridis, J.Korecki "Adsorpcja CO na powierzchni Fe₃O₄(111)", 9. Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2016', Zakopane 2016

63. E.Lalik, G.Mordarski, R.P.Socha "On the chaotic reproducibility of electrical parameters accompanying the oscillatory sorption of H₂ and D₂ in metallic Pd powder", 14th Experimental Chaos and Complexity Conf. ECC 2016, Banff 2016
64. E.Lalik, T.Szumelda, R.Kosydar, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, M.Kołodziej, W.Rojek, T.Machej, E.Bielańska, A.Drelinkiewicz "Humidity induced deactivation of Al₂O₃ and SiO₂ supported Pd, Pt, Pd-Pt catalysts in H₂ + O₂ recombination, the catalytic, calorimetric and DFT studies", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
65. F.Lisiecki, P.Kuświka, H.Głowiński, M.Maczaka, J.Rychły, P.Mazalski, M.Krawczyk, A.Maziewski, F.Stobiecki, J.Dubowik "Magnetic dynamics of periodic and quasiperiodic arrays of NiFe nanostripes", 21st Int. Conf. on Microwaves, Radar and Wireless Communications MIKON 2016, Kraków 2016
66. D.Lupa, M.Oćwieja, Z.Adamczyk, H.Mrowiec, S.Walas "Oxidative dissolution of silver nanoparticles: a new, two-step theoretical model and experimental study", Int. Workshop on Functional Nanoporous Materials FuNaM, Krakow 2016
67. D.Lupa, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, T.Basinska, M.Gosecka "Kinetyka tworzenia i właściwości monowarstw hydrofilowych cząstek polimerowych", Sem. 'Samoorganizacja, mikroskopia, spektroskopia', Kraków 2016
68. K.Luther, M.Krzan "Luga - Centrum Kosmetyczne S.C. – innowacyjna firma kosmologiczna", Konf. 'Nowoczesna Kosmetologia - od Nauki od Biznesu', Kraków 2016
69. W.Łasocha, M.Grzesiak, A.Rafalska-Łasocha, M.Oszajca "Coordination polymers – new hopes and old troubles", 15th European Powder Diffraction Conference EPDIC, Bari 2016
70. M.Łomzik, M.Brindell, D.Rutkowska-Zbik, G.Stochel, P.C.Gros "Synthesis and characterisation of novel ruthenium(II) complexes with pyridine-2-carboxyaldehyde semicarbazone moiety", 3rd European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms ECRIM-2016, Kraków 2016
71. J.Maciejewska, Z.Adamczyk, K.Kubiak, M.Oćwieja "Gold nanoparticle monolayers of controlled coverage and structure", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
72. J.Maciejewska, M.Oćwieja, K.Kubiak, M.Morga, Z.Adamczyk "Formation of gold nanoparticles of controlled structure and electrokinetic properties", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
73. J.Maciejewska-Prończuk, M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja, M.Zimowska "Otrzymywanie monowarstw nanocząstek złota o kontrolowanej strukturze", Sem. 'Samoorganizacja, mikroskopia, spektroskopia', Kraków 2016
74. J.Maciejewska-Prończuk, M.Oćwieja, A.Węgrzynowicz, P.Michorczyk, Z.Adamczyk, M.Roman, E.Bielańska "Efficient catalyst for water gas shift reaction based on iron oxide nanoparticles doped by chromium", Int. Workshop on Functional Nanoporous Materials FuNaM, Krakow 2016

75. P.Mazalski, W.Dobrogowski, J.McCord, A.Wawro, N.Spiridis, A.Maziewski "Variation of magnetic domain structure in Pt/Co/Pt film driven by ion irradiation", 8th Joint European Magnetic Symp. JEMS 2016, Glasgow 2016
76. P.Mazalski, J.Kisielewski, M.Jakoubowski, Z.Kurant, I.Sveklo, T.Wojciechowski, N.Tahir, R.Bali, J.Fassbender, A.Wawro, N.Spiridis, A.Maziewski "Tuning of magnetic properties of ultrathin films", European XFEL Users' Meeting 2016 & DESY Photon Science Users' Meeting 2016, Hamburg 2016
77. P.Mazalski, R.Socha, I.Sveklo, Z.Kurant, A.Rogalev, J.Fassbender, A.Wawro, A.Maziewski "Chemical composition and magnetic properties of Pt/Co/Pt nanostructure modified by ion irradiation", Int. Science@FELs Conf., Trieste 2016
78. P.Mazalski, I.Sveklo, Z.Kurant, K.Olefs, A.Rogalev, F.Wilhelm, J.Fassbender, A.Wawro, A.Maziewski "XMCD studies of Pt/Co/Pt nanostructures modified by Ga⁺ ion irradiations", 13th Int. School and Symp. on Synchrotron Radiation in Natural Science ISSRNS'2016, Ustroń 2016
79. J.Miąsik, Ł.Mokrzycki, W.Rojek, T.Machej, D.Duraczyńska, A.Gancarczyk, A. Kołodziej "Solid foams as structured catalyst: preparation and activity in toluene combustion reaction", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
80. J.Miąsik, W.Rojek, Ł.Mokrzycki, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, A.Żelazny, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Badania nad uwodornieniem alkoholu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu na katalizatorach żelazowych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
81. J.Miąsik, W.Rojek, Ł.Mokrzycki, T.Machej, K.Samson, M.Śliwa, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Grabowski, A.Żelazny, A.Kornas, D.Rutkowska-Żbik "Uwodornienie alkoholu furfurylowego w kierunku 2-metylofuranu na katalizatorach żelazowych", . Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
82. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula, E.Bielańska, M.Nattich-Rak, E.M.Serwicka-Bahranowska "Composites of Laponite and Mn-Cu-Zr-Ce-Al hydrotalcites prepared by inverse microemulsion", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
83. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, R.Dula, E.Bielańska, R.P.Socha, J.Kryściak-Czerwenka, J.Olszówka, Ł.Mokrzycki, E.M. erwicka "Catalytic combustion of toluene over composites derived from Laponite intercalated with Mn-Al hydrotalcite prepared in reverse microemulsion", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
84. A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Rogowska, R.Dula, E.Bielańska, Ł.Mokrzycki, W.Rojek, A.Gaweł, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Montmorillonite/TiO₂ composites as supports for Mn-Al-O mixed oxide catalyst for combustion of toluene: pillaring vs. inverse microemulsion intercalation", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
85. A.Michna, Z.Adamczyk, M.Williams, S.P.Armes "Revealing the Formation and Stability of Fluorescently-labeled poly(ethylene imine) Monolayers on Mica via DLS and Electrokinetic Methods", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016

86. A.Mińczewska, E.Wierus, P.Porębski, B.Trzewik, J.Korecki, T.Makris, M.Chruszcz, W.Minor, T.Borowski "Joined computational and experimental study on the reaction mechanisms of acireductone dioxygenases", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
87. A.Mińczewska, E.Wierus, P.Porębski, B.Trzewik, J.Korecki, T.Makris, M.Chruszcz, W.Minor, T.Borowski "Joined computational and experimental study on the reaction mechanisms of acireductone dioxygenases", 8th conf. 'Molecular Quantum Mechanics', Uppsala 2016
88. M.Motak, D.Duraczyńska, R.Dębek, D.Wierzbicki, K.Świrk, B.Samojedyn "Badania SEM nanotlenkowych katalizatorów otrzymanych na bazie hydrotalkitu w procesie DRM", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
89. B.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Dula, E.Bieleńska, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Composites derived from Laponite intercalated with Mn-Al hydrotalcite prepared by inverse microemulsion", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
90. M.Nattich-Rak, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Sadowska "Determining mechanism of human fibrinogen and human albumin adsorption on mica via optical microscopy, Atomic Force Microscope and scanning electron microscope", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
91. M.Nattich-Rak, M.Wasilewska, Z.Adamczyk, M.Sadowska "Human fibrinogen adsorption mechanisms revealed by Atomic Force Microscope, streaming potential and colloid deposition measurements", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
92. G.Nawrat, G.Lach, Ł.Nieużyła, P.Nowak "Twarde powłoki tlenkowe na stopach aluminium", 24. Ogólnopolska Konf. Naukowo-Techniczna Antykorozyja, Ustroń 2016
93. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Karcz, M.Witko, E.Serwicka "Co²⁺ w strukturze heteropolikwasów HPW i HPMo o geometrii anionu Keggina – obliczenia DFT vs. badania doświadczalne", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
94. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, R.Karcz, M.Witko, E.M.Serwicka "Co-modified heteropolyacids. DFT theory vs. experimental results", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
95. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Właściwości redoksove heteropolikwasów w funkcji ich składu chemicznego i struktury geometrycznej polianionu", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
96. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Aktywacja cząsteczki O₂ na heteropolianionach o strukturze Wellsa-Dawsona, modyfikowanych w pozycji atomu addenda", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
97. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Obliczenia procesu aktywacji cząsteczki O₂ na modyfikowanych HPA o strukturze anionu Keggina", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016

98. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "ROS activation on transition metal cations introduced in tungsten and molybdenum heteropolyacids with the Keggin structure. DFT cluster model study", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
99. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, D.Lupa, H.Mrowiec, S.Walas "Oxidative dissolution of silver nanoparticles - experimental studies and new theoretical model", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
100. M.Oćwieja, A.Węgrzynowicz, J.Maciejewska, P.Michorzyc, Z.Adamczyk "Nanocząstki tlenków żelaza – efektywne katalizatory reakcji konwersji tlenku węgla parą wodną", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
101. N.Ogrodowicz, R.Gryboś, A.Micek-Ilnicka "Heteropolikwas typu Dawsona $H_6P_2Mo_{18}O_{62}$ jako potencjalny katalizator w reakcjach eteryfikacji", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
102. L.Ohnoutek, L.Beran, P.Mazalski, I.Sveklo, A.Maziewski, A.Wawro, J.Fassbender, M.Weis "a+ Irradiation driven changes of magneto-optical spectra of Co ultrathin films with Pt and Au interfaces", 8th Joint European Magnetic Symp. JEMS 2016, Glasgow 2016
103. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bielańska, R.Dula, M.Krzan, B.Napruszewska, M.Nattich-Rak, A.Klimek, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Magnezyt i dolomit jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu przy użyciu nadłtenu wodoru - wpływ aktywacji mechanochemicznej", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
104. J.Olszówka, R.Karcz, E.Bielańska, B.Napruszewska, E.M.Serwicka "Catalytic oxidation of cyclohexanone to caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite catalysts with different degree of crystallinity", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
105. J.Olszówka, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Metalloporphyrins as catalysts for oxidation of limonene with molecular oxygen-influence of catalyst structure on reaction activity and selectivity", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
106. K.Onik, M.Gackowski, A.Dziedzicka, E.Bielańska, M.Derewiński, B.Sulikowski "Synthesis of protozeolitic nanoclusters and mesoporous hierarchical materials: physicochemical characteristics and transformations of α -pinene in the liquid phase", 18th Int. Zeolite Conf. Rio de Janeiro 2016
107. K.Onik, M. Gackowski, A. Dziedzicka, M. Derewiński, B. Sulikowski "Isomerization of α -pinene on mesoporous hierarchical materials synthesized from protozeolitic nanoclusters", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
108. A.F.Orliukas, V.Venckutė, S.Daugėla, A.Kežionis, A.Dindune, D.Valdniece, J.Ronis, M.Lelis, M.Mosiąlek, T.Šalkus "Synthesis, structure and impedance spectroscopy of $NaCsZn_{0.5}Mn_{0.5}P_2O_7$ pyrophosphate ceramics", 12th Int. Symp. on Systems with Fast Ionic Transport, Kaunas 2016
109. Ł.Orzeł, D.Rutkowska-Zbik, K.Dyla, A.Kania, L.Fiedor, R.van Eldik, G.Stochel "Redox pathways of chlorophylls (trans)metallation", 3rd European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms ECRIM-2016, Kraków 2016

110. M.Oszajca, W.Łasocha "Overcoming Pitfalls in X-Ray Powder Diffraction Based Structure Determination of Polymolybdate Structures", 58. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2016
111. M.Oszajca, W.Łasocha, G.Matveeva, U.Kolb "New polyoxomolybdates from powder diffraction data - problems and solutions", 15th European Powder Diffraction Conference EPDIC, Bari 2016
112. A.Pacuła, R.P.Socha E.Bielańska, J.Żukrowski "Examination of N-doped carbon materials derived from Mg-Fe-Al layered double hydroxides and acetonitrile as electrocatalysts for oxygen reduction reaction", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
113. H.Pálková, M.Zimowska, Ľ.Jankovič, B.Sulikowski, E.M.Serwicka, J.Madejová "The effect of the organic cation central atom on the thermal stability of organo-montmorillonites", 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016
114. K.Pamin, S.Basąg, J.Połtowicz, R.Tokarz-Sobieraj "Application of glycerol as green solvent in phenol oxidation catalyzed by sulphonated metallophthalocyanines with hydrogen peroxide", 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen', Kraków 2016
115. K.Pamin, J.Połtowicz, D.Duraczyńska, M.Zimowska, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka "Selektywne uwodornienie benzenu na katalizatorach metalicznych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
116. K.Pamin, M.Prończuk, S.Basąg, W.Kubiak, Z.Sojka, J.Połtowicz "Synteza nowych organiczno-nieorganicznych hybryd i ich fizykochemiczna charakterystyka", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
117. K.Pamin, E.Tabor, S.Basąg, J.Połtowicz "Three generations of cobalt porphyrins as catalysts of cycloalkanes oxidation with molecular oxygen", 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen', Kraków 2016
118. K.Pamin, N.Wolan, S.Basąg, J.Połtowicz, R.Tokarz-Sobieraj "Glycerol as alternative solvent in phenol oxidation catalyzed by sulphonated metallosalens with hydrogen peroxide", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
119. T.Pańczyk, Ł.Kończak, P.Wolski "Unloading of drugs molecules from carbon nanotubes inner cavities by pH change insights from molecular dynamics simulations", 17th Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes and low-dimensional materials NT16, Vienna 2016
120. J.Piotrowska, R.Karcz, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, D.Mucha, E.Bielańska, M.Krzan, M.Nattich-Rak, E.M.Serwicka, „Catalytic oxidation of cyclohexanone to ε-caprolactone with hydrogen peroxide over hydrotalcite-like materials subjected to grinding”, 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen', Kraków 2016
121. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Nanoencapsulation of neuroprotective drugs and evaluation of their action in human neuroblastoma cell line", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016

122. W. Płaziński "Conformational preferences of acyclic aldo- and ketohexoses and their implication for anomeric equilibria", 28th Int. Carbohydrate Symp., New Orleans 2016
123. W. Płaziński "Stereoselective Binding of Agonists to β 2-Adrenergic Receptor: A Molecular Modelling Study", 21st EuroQSAR Conf., Verona 2016
124. W. Płaziński "Ligand-Induced Conformational Motions of the W286 Residue of the β 2-Adrenergic Receptor: Fluorescence Spectroscopy and Molecular Dynamics Study", 21st EuroQSAR Conf., Verona 2016
125. K. Podgórna, A. Pittermannova, K. Szczepanowicz, J. Cejkova, F. Stepanek, P. Warszyński "Fluorescent labeled alginate microparticles produced by microfluidization method", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016
126. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, M. Piotrowski, M. Gajdošová, F. Štěpánek, P. Warszyński "Gadolinium alginate nanogels for theranostic applications", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
127. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, M. Piotrowski, D. Jantas, K. Jankowska, P. Warszyński "Nanoparticles gels for biomedical applications", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
128. K. Podgórna, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Formation of polyelectrolytes shells on nanogels surfaces", Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
129. J. Połtowicz, K. Pamin, J. Kryściak-Czerwenka, D. Napruszewska, E. Serwicka-Bahranowska "Heteropolizwiązki jako katalizatory utleniania cykloheksanonu do ϵ -kapolaktonu tlenem molekularnym", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
130. A. Popov, M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Ramanavicius, A. Ramanavicie "Deposition of silver nanoparticles from suspensions containing tannic acid", 9th Nanoconf. Advance in Bioelectrochemistry and Nanomaterials, Vilnius 2016
131. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak-Nowak, W. Łasocha "X-ray powder diffractometry in the study of heritage objects from Polish museums", 30th European Crystallographic Meeting, Basel 2016
132. A. Rafalska-Łasocha, D. Sarkowicz, M. Grzesiak-Nowak, M. Sieklucka, A. Klisińska-Kopacz, M. Matosz, J. del Hoyo-Meléndez, W. Łasocha "Badania materiałów malarskich w wybranych pracach Henryka Siemiradzkiego", 58. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2016
133. W. Rojek, T. Machej, K. Samson, R. Grabowski, M. Śliwa, Ł. Mokrzycki, M. Ruggiero-Mikołajczyk, A. Żelazny, A. Kornas, J. Miąsik, D. Rutkowska-Żbik "Chromites as promising catalysts for hydrogenolysis of furfural and furfuryl alcohol", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
134. M. Ruggiero-Mikołajczyk, B. Rivas Murias, F. Rivadulla, G. Mordarski, R. Grabowski, M. Śliwa, A. Żelazny, K. Samson, A. Kornas, D. Rutkowska-Żbik "Catalytic decomposition of methane on the electrode materials used in solid oxide fuel cells", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016

135. A.Rugor, T.Janeczko, M.Hochołowski, M.Guzik, M.Szaleniec "Selective modifications of steroid and sterols by enzymes from bacterial cholesterol degradation pathway", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
136. A.Rugor, M.Tataruch, J.Staroń, M.Guzik, M.Szaleniec "Structure, reactivity and application of steroid C25 dehydrogenase, a molybdenum enzyme hydroxylating sterols and vitamin D3", 8th Int. Congr on Biocatalysis, Hamburg 2016
137. A.Rugor, A.Wójcik, M.Szaleniec "Reaction mechanism of regioselective sterol hydroxylation catalyzed by steroid C25 dehydrogenase: quantum chemical study", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
138. D.Rutkowska-Zbik "Dioxygen Binding and Activation on Cobalt(II) Complexes: DFT Studies", 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen', Kraków 2016
139. D.Rutkowska-Zbik, M.Buchalska, S.Wojtyła, W.Macyk "From heterogeneous photocatalysts to homogeneous photosensitizers: Ti(IV) complexes as photosensitizers of oxygen. Experimental and computational approach", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
140. D.Rutkowska-Zbik, A.Drzwiecka-Matuszek, M.Witko "Mechanistic Studies on Cp d(II) Oxidation of Alcohols", 5th Scientific Workshop ECOSTBio, Kraków 2016
141. D.Rutkowska-Zbik, A.Drzwiecka-Matuszek, M.Witko "Insight into Compound II oxidation ability towards alcohols and aldehydes—energetic pathways and ligand effect", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
142. D.Rutkowska-Zbik, A.Drzwiecka-Matuszek, M.Witko "Mechanistic studies on Cp d(II) oxidation of alcohols", Conf. 'Current Trends in Theoretical Chemistry VII', Kraków, 2016
143. D.Rutkowska-Zbik, Ł.Orzeł, M.Świrski, A.Kania, A.Drzwiecka-Matuszek, M.Witko, G.Stochel "Czynniki warunkujące transmetalację metaloporfiryn", 3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2016
144. M.Sadowska, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Oćwieja "Monolayers of silver nanoparticles on polymer micro-spheres", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
145. D.Sarkowicz, A.Rafalska-Łasocha, M.Siekłucka, A.Klisińska-Kopacz, M.Matosz, J.de Hoyo-Mendez, M.Grzesiak-Nowak, W.Łasocha "Painting materials used by Henryk Siemiradzki in some of his works", 1st CrysAC Workshop Cultural heritage authentication and forensic science & 6th Meeting on X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage, Krakow 2016
146. E.Sikora, M.Oćwieja, E.Kozieł "Study of nanosilver release from antibacterial gel formulation", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
147. A.Stańczak, A.Miłaczewska, T.Borowski, A.Góra "Reaction energy profiles for oxidative aliphatic carbon-carbon bond cleavage reactions of Cu(II) Chlorodiketonate Complexes. Double- ζ vs. triple- ζ basis set for geometry optimization", Gliwice Scientific Meetings, Gliwice 2016

148. J.Staroń, E.Cichoń, M.Stefaniak, M.Guzik "Chemo-biotechnological synthesis of precursors for biocatalytic acylation of sugars", 17th European Congress on Biotechnology, Krakow 2016
149. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Theoretical insight into NO activation/deactivation by ammonia modified cobalt centers in zeolites", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
150. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Structural and electronic properties of ammonia-modified Co²⁺ centers in zeolites with NO as a probe molecule - theoretical study", 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Siofok 2016
151. A.Stępniewski, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek "Theoretical insight into NO activation/deactivation by ammonia modified cobalt centers in zeolites", Conf. 'Modeling & Design of Molecular Materials', Trzebnica 2016
152. R.Stokłosa, S.Świątek, B. Jachimska "Proces agregacji laktoglobuliny (LGB) w roztworach elektrolitów", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
153. B.Sulikowski, J.Datka, K.Tarach, K.Durczyk "Monitoring formation of ultrastable zeolite Y by NMR and IR spectroscopies used *in tandem*", 13th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Siofok 2016
154. B.Sulikowski, J.Datka, K.Tarach, K.Durczyk "Ultrastabilization of zeolite Y as monitored by solid-state NMR and IR spectroscopies", 6th Int. Workshop on Layered Materials, Kutná Hora 2016
155. M.Szaleniec, J.Heider "Enzymatic C-C bond formation by benzylsuccinate synthases – theoretical study of the mechanism", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
156. M.Szaleniec, J.Heider "Elucidation of factors responsible for enantiospecificity in radical C-C coupling catalyzed by benzylsuccinate synthase", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
157. M.Szaleniec, J.Heider "Enzymatic C-C bond formation by benzylsuccinate synthases – A key step in anaerobic microbial degradation of hydrocarbons", 17th European Congress on Biotechnology, Krakow 2016
158. M.Szaleniec, A.Rugor, T.Janeczko, M.Hocholowski, M.Guzik "Selective modifications of steroids and sterols by enzymes from bacterial cholesterol degradation pathway", 17th European Congress on Biotechnology, Krakow 2016
159. M.Szaleniec, A.Rugor, A.Wójcik "Steroid C25 dehydrogenase – the mechanism of regioselective hydroxylation of sterols and cholecalciferol", 17th European Congress on Biotechnology, Krakow 2016
160. K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Piotrowski, M.Leśkiewicz, M.Regulska, W.Lasoń, P.Warszyński "Encapsulation of curcumin in polyelectrolyte nanocapsules", 24th Int. Conf. on Bioencapsulation, Lisbon 2016

161. K.Szczepanowicz, D.Jantas, M.Piotrowski, J.Staroń, M.Leśkiewicz, M.Regulska, W.Lasoń, P.Warszyński "Encapsulation of curcumin in polyelectrolyte nanocapsules and their neuroprotective activity", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
162. K.Szczepanowicz, T.Kruk, P.Warszyński "Pegylated polyelectrolyte multilayer films as the "antifouling" coatings protecting against non-specific proteins adsorption", Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
163. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, A.Karabasz, M.Bzowska, P.Warszyński "Magnetic nanocapsules for delivery of therapeutic compounds", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
164. M.Szczęch, O.Marszałek, M.Piotrowski, D.Jantas, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Neuroprotectants-loaded nanoparticles as efficient (brain) drug delivery systems", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
165. M.Szczęch, O.Marszałek, M.Piotrowski, A.Kida, S.Łukasiewicz, E.Błasiak, M.Dziedzicka-Wasylewska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "The polymer-based nanoparticles as neuroprotectants-loaded carriers for brain drug delivery", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
166. M.Szczęch, M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Influence of the surface properties of colloidal poly(ϵ -caprolactone) nanospheres on its stability in bio-fluids", Conf. 'Soft Matter at Aqueous Interface SOMATAI', Crete 2016
167. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, D.Jantas, P.Warszyński "The neuroprotectants-loaded nanoparticles for (brain) drug delivery system", 24th Int. Conf. on Bioencapsulation, Lisbon 2016
168. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Synthesis of polyplexes as nanocarriers for plasmid DNA delivery systems", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
169. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Biodegradable and non-toxic polymer-based nanocarriers for plasmid DNA delivery", 2nd Central European Biomedical Congr. CEBC, Krakow 2016
170. M.Szczęch, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Plasmid DNA delivery systems based on biopolymeric nanocarriers", Int. Conf. & Exhibition NanoTech Poland, Poznań 2016
171. T.Szumelda, A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, L.Matachowski, E.Lalik "Chaos in oscillatory recombination of hydrogen and oxygen on Pd-based catalysts", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
172. T.Szumelda, M.Góral-Kurbiel, R.Kosydar, J.Gurgul, E.Bielańska, A.Drelinkiewicz "Controlling nanostructure of bimetallic Pd-M (M = Au, Ir, Pt, Ru) catalysts prepared by the reverse "water-in-oil" microemulsion method", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016

173. S.Świątek, B.Jachimska "Wpływ pH i siły jonowej na adsorpcję wołowej β -laktoglobuliny na powierzchni złota", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
174. S.Świątek, R.Stokłosa, B.Jachimska "Funkcjonalne warstwy wołowej beta-laktoglobuliny do zastosowań biomedycznych", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
175. E.Tabor, S.Basąg, K.Pamin, J.Połtowicz, W.Kubiak "Katalityczne i elektrochemiczne właściwości μ -oxo porfiryn żelaza", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
176. K.A.Tarach, K.Gołąbek, U.Filek, K.Góra-Marek "Ethanol transformation over 10 MR zeolites: the role of pore architecture", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
177. K.A.Tarach, J.Tekla, W.Makowski, U.Filek, K.Mlekodaj, V.Girman, M.Choi, K.Góra-Marek "Hierarchical MFI zeolites as the catalysts in alcohol dehydration: the role of microporous environment and secondary mesoporosity", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
178. M.Tataruch, A.Rugor, K.Szymańska, A.Jarzębski, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, M.Witko, M.Szaleniec "Immobilizacja dehydrogenazy C25-steroidowej – testy w reaktorach okresowych i przepływowych", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
179. J.Tekla, K.A.Tarach, U.Filek, I.Tarach, K.Góra-Marek "Hierarchiczny zeolit L jako katalizator procesu dehydratacji etanolu", 59. Zjazd Naukowy PTChem, Poznań 2016
180. K.Tokarczyk, B.Jachimska "Interaction of Common Body Proteins with PAMAM dendrimers", Faraday Discussion 'Nanoparticles with Morphological and Functional Anisotropy', Glasgow 2016
181. K.Tokarczyk, P.Komorek, I.Kralka, B.Jachimska "Combining surface plasmon resonance and quartz crystal microbalance to determine hydration of protein monolayers", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
182. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, B.Jachimska "Insight into bovine serum albumin adsorption on a hydrophilic silica surface using surface plasmon resonance and molecular dynamics simulation", ARCHIE-West Showcase Workshop, Glasgow2016
183. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, B.Jachimska "Insight into bovine serum albumin adsorption on a hydrophilic silica surface using surface plasmon resonance and molecular dynamics simulation", Nanomaterials for Technology Workshop, Glasgow2016
184. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, B.Jachimska "Surface functionalization with Bovine Serum Albumin (BSA): surface plasmon resonance and molecular dynamics analyses", Faraday Discussion 'Nanoparticles with Morphological and Functional Anisotropy', Glasgow2016

185. K.Tokarczyk, K.Kubiak-Ossowska, P.A.Mulheran, I.Kralka, P.Komorek, B.Jachimska "Towards modern drug carriers: physicochemical characterization of protein using simulation and experiment", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
186. K.Tokarczyk, P.Wolski, T.Pańczyk, B.Jachimska "Physicochemical properties and catalytic applications of PAMAM dendrimers", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
187. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, R.Gryboś, M.Wit "Badania teoretyczne aktywności katalitycznej soli heteropolikwasów", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
188. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, R.Karcz, E.M.Serwicka, M.Witko "Co²⁺ ions in the keggin structure of tungsten and molybdenum heteropolyacids. DFT calculations vs. experimental results", 16th Int. Congr. on Catalysis, Beijing 2016
189. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, K.Pamin, U.Filek "Copper (Cu-HPA) modified heteropolyacids. DFT calculations vs. experimental results", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
190. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec, M.Witko "Oxygen activation on Co-HPA systems. DFT study", 3rd Int. Sci. Conf. 'Oxygenalia 2016 The Faces of Oxygen', Kraków 2016
191. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, E.Lalik, T.Szumelda, A.Drelinkiewicz "Water interaction with mono- and bi-metallic nanoclusters. DFT cluster model study vs. experimental results", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
192. B.Tyliszczak, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, S.Kudłacik, K.Bialik-Wąs, A.Drabczyk, V.Ungalantha, M.Lofti, A.Javadi, E.Mileva, P.Warszyński, R.Todorov, F.Ravera, L.Liggieri, R.Miller, D.Exerowa, M.Krzan "Biodegradable aqueous foams containing various polysaccharides - biofoams for industrial and biomedical applications", 7th Workshop on Green Chemistry and Nanotechnologies in Polymer Chemistry & 4th National Nanotechnology and Polymer Congr., San Jose, Costa Rica 2016
193. P.Weroński, P.Batys "Szorstkość modelowych monowarstw monodispersyjnych cząstek cylindrycznych", Sem. 'Samoorganizacja, mikroskopia, spektroskopia', Kraków 2016
194. A.Wiertel, J.Zawała, A.Niecikowska, K.Malyś "Kinetics of bubble coalescence at surfaces of different liquids –influence of external disturbances and size of the liquid films formed", Symp. SGI-FunC & Conf. COST Smart and Green Interfaces, Athens 2016
195. M.Włodek, M.Kolasińska-Sojka, M.Szuwarzynski, M.Wasilewska, P.Warszynki "Effect of surface properties of the cushion material on supported lipid bilayer formation", 30th European Colloid and Interface Society Conf. ECIS 2016, Rome 2016
196. J.Wojas, N.Kwiatek, K.Freindl, N.Spiridis, J.Korecki "Utlenianie epitaksjalnej warstwy Fe₃O₄ na podłożu Pt(111) do α-Fe₂O₃", 9. Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2016', Zakopane 2016

197. Z.Wojdyła, T.Borowski "DFT study of nitroxygenase activity of manganese quercetin 2,3-dioxygenase", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
198. P.Wolski T.Pańczyk "Self-organization of doxorubicin and selected dyes molecules in inner cavity of carbon nanotubes functionalized by folic acid. A molecular dynamics study", 17th Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes and low-dimensional materials NT16, Vienna 2016
199. P.Wolski, T.Pańczyk "Co-adsorption of doxorubicin and some dyes in carbon nanotubes functionalized by folate targetic factor. A molecular dynamics study", World Conf. on Carbon 'Common fundamentals, remarkably versatile applications CARBON 2016', State College PA 2016
200. P.Wolski, T.Pańczyk "Folate targetic factor affects co-adsorption of doxorubicin and some dyes in carbon nanotubes. A molecular dynamics study", 14th Annual Congr. of International Drug Discovery Science and Technology IDDST-South Korea 2016, Gyeonggi 2016
201. P.Wolski, T.Pańczyk "pH controlled self-organization of doxorubicin and selected dyes inside a carbon nanotubes. A molecular dynamics study", Conf. 'Physics of Liquid Matter: Modern Problems PLMMP-2016', Kyiv 2016
202. P.Wolski, T.Pańczyk "Drug delivery system based on co-adsorption of doxorubicin and selected dyes in carbon nanotubes functionalized by folic acid. A molecular dynamics study", 16th Int. Conf on Theoretical Aspects of Catalysis, Zakopane 2016
203. M.Zimowska, J.Gurgul, L.Matachowski, D.Mucha, K.Łątka "The production of hydrogen from ethanol and water mixtures in nitrogen atmosphere over new Fe_xO_y / MoO₃ systems", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
204. M.Zimowska, L.Lityńska-Dobrzyńska, J.Gurgul, R.P.Socha, L.Matachowski, K.Łątka, R.Dula, H.Pálková, J.Kryściak-Czerwenka, R.Karcz, D.Napruszewska "Fe-modified porous clay heterostructures: influence of surface composition and acidity on catalytic properties", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
205. M.Zimowska, A.Michalik-Zym, J.Kryściak-Czerwenka, R.Dula, K.Pamin, K.Bahranowski, Z.Olejniczak, L.Lityńska-Dobrzyńska, E.M.Serwicka "Acidity of aluminated FSM-16 silicas: a comparative study of direct versus post-synthesis aluminaton", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
206. M.Zimowska, H.Pálková, L.Jankovič, D.Duraczyńska, G.Mordarski, J.Madejová, E.M.Serwicka "Organo-clays as supports for immobilization of ruthenium nanoparticles", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016
207. M.Zimowska, H.Pálková, L.Jankovič, D.Duraczyńska, G.Mordarski, J.Madejová, E.M.Serwicka "Organo-clays as supports for immobilization of ruthenium nanoparticles", 8th Mid-European Clay Conf. MECC 2016, Kosice 2016

208. A.Żelazny, R.Grabowski, M.Śliwa, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, A Kornas, D.Duraczyńska "Wpływ metody preparatyki katalizatorów Cu/MxOy na właściwości fizykochemiczne i katalityczne w reakcji hydrogenolizy glicerolu", 48. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2016

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. P.Batys "Surface and transport properties of colloidal particle multilayers at solid/liquid interface", Uniwersytet w Aalto, 2016
2. A.Drelinkiewicz "Kataliza - bezpieczeństwo instalacji nuklearnych", Sesja PTChem, Kraków 2016
3. M.Guzik "Irlandia, bioplastik, Polska", Meet Biotech Boost Biotech, Pauza in Garden, Kraków 2016
4. M.Guzik "Wykorzystanie potencjału bakteryjnych polimerów", Life Science Open Space, Kraków 2016
5. B.Jachimska "A comprehensive study of protein adsorption", University of Strathclyde, Glasgow 2016
6. B.Jachimska "Self-assembling behavior of proteins: from solution to surface", National Center for Nanoscience and Technology (NCNST), Chinese Academy of Sciences, Beijing 2016
7. J.Korecki, "Powierzchnia jak żywa, czyli LEEM - mikroskopia elektronowa na niskoenergetycznych elektronach", Krakowskie Konwersatorium Fizyczne, Instytut Fizyki UJ, Kraków 2026
8. M. Krzan "Influence of various physico-chemical properties on bubble motion in surface active agents solution", Max-Planck Institute for Colloids and Surface Chemistry, Golm/Potsdam 2016
9. M.Krzan "Physico-chemical and hydrodynamic aspects of the bubble motion in surface active agent solutions", Department of Chemistry and Pharmaceutical Engineering of Sofia University, Sofia 2016
10. M.Krzan "Development of steady state adsorption distribution over interface of a bubble rising in solutions of n-alkanols (from etanol till n-decanol)", University of Chemistry and Technology, Prague 2016
11. M.Krzan "Influence of various physico-chemical properties on bubble motion in surface active agents solution", Institute of Chemical Process Fundamentals, Czech Academy of Science, Prague 2016

12. M.Krzan, E.Jarek, H.Petkova, E.Santini, L.Szyk-Warszyńska, S.Kudlacik, K.Bialik-Was, A.Drabczyk, B.Tyliszczak, F.Ravera, R.Todorov, P.Warszyński, E.Mileva, L.Ligierrri, D.Exerowa "Particle laden stabilization of foams consisting biological active compounds", Institute of Surface Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia 2016
13. W.Łasocha "Crystallography for Art.: Contribution of X-ray powder diffractometry", Institute of Science and Technology in Art (ISTA), Akademie der Bildenden Künste, Vienna 2016
14. A.Micek-Ilnicka "Polyoxometallates chemistry as a theme of the future collaboration between Institute of Catalysis and Surface Chemistry and University of Palermo", University of Palermo, 2016
15. M.Mosiąlek "Instability of noble metal electrodes in solid oxide fuel cell", Faculty of Physics, Vilnius University, Vilnius 2016
16. M.Oćwieja "Lecimy w kulki - słów kilka o nanocząstkach srebra", wykład w ramach Projektu Unijnego IRRESESISTIBLE wprowadzającego odpowiedzialne badania naukowe i innowacja dla klasy szkolnej dla uczniów, 2. Gimnazjum im. Adama Mickiewicza, Kraków 2016
17. M.Oćwieja "Preparatyka i stabilność nanocząstek srebra oraz ich monowarstw", Instytutcie Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego, Kraków 2016
18. D.Rutkowska-Żbik "Efekty projektu NanoEIS", Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2016
19. E.Serwicka-Bahranowska "Catalysts derived from layered minerals for abatement of volatile organic compounds", Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, Kraków 2016
20. E.Serwicka-Bahranowska "Design of mesoporous silica supports derived from layered silicate minerals", Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, Kraków 2016
21. R.Socha "Badacz i badania naukowe", Gimnazjum z Oddziałami Integracyjnymi nr 32 im. Polskich Noblistów, Kraków 2016
22. M.Strojecki "Mikroklimat zabytkowych wnętrz - problemy, zagrożenia, prewencja na przykładzie polskich świątyń", Instytut Historii Architektury i Konserwacji Zabytków, Wydział Architektury, Politechnika Krakowska, 2016
23. M.Tataruch "The basics of enzyme immobilization", Department of Biology Philipps-Universität, Marburg 2016
24. M.Zimowska "Functionalization of innovative porous structures derived from layered minerals", Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Bratislava 2016

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. S. Błażej-Sosnkowska, P. Godlewski (Fundacja JWP) "Wynalazki a badania patentowe. Co każdy wiedzieć powinien"
2. W.M. Briscoe (School of Chemistry, of University of Bristol) "Unravel Buried Soft Interfaces: From Lipid Bilayers to Responsive Polymer Brushes"
3. J. Datka (Wydział Chemii UJ) "Zeolity hierarchiczne – desilikacja"
4. J. Datka (Wydział Chemii UJ) "Hierarchiczne zeolity Y – desilikacja"
5. K. Karlińska-Batres (Thomson Reuters Web of Science) "Wprowadzenie do bazy bibliograficzno-abstraktowej Web of Science Core Collection"
6. J.Z. Larese (Chemistry Department of Tennessee University in Knoxville) "Neutron Scattering Studies of Molecular Adsorption on Surfaces"
7. M. Niechaj (Muzeum Historyczne m. Krakowa) "Fenomen szopki krakowskiej - złota legenda Krakowa w szopce zaklęta" [wykład bożonarodzeniowy]
8. E. Przybył-Sadowska (Instytut Religioznawstwa UJ) "Wielkanoc – historia święta i zwyczaje" [wykład wielkanocny]
9. A. Steinbuechel (Institut für Molekulare Mikrobiologie und Biotechnologie, Münster) "Cyanophycin – an Unknown and Neglected Biopolymer with Potential for Applications"
10. S.P. de Visser (Manchester Institute of Biotechnology and School of Chemical Engineering and Analytical Science) "Computational studies of oxygen activating enzymes and biomimetic model complexes"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. J. Barbasz "Analiza wpływu powierzchni na właściwości makromolekuł"
2. E. Broclawik "Centra metali przejściowych w zeolitach: małe modele i zaawansowane metody funkcji falowej czy modelowanie periodyczne DFT?"
3. M. Gackowski "Monolity krzemionkowe z naniesionymi nanocząstkami zeolitu jako modelowe mikroreaktory przepływowe"
4. B. Jachimska "Program Top500 Innovators – Cambridge 40.10"
5. B. Jachimska "Struktura i właściwości warstw białkowych"
6. J. Korecki "Powierzchnia jak żywa, czyli mikroskopia elektronowa na niskoenergetycznych elektronach"

7. M.Kowacz "Wpływ czynników fizycznych i chemicznych na dynamikę struktury wody – konsekwencje dla procesu samoorganizacji materii"
8. M.Krzan "Energetyka jądrowa jako nowy, interdyscyplinarny obszar badawczo-wdrożeniowy – na podstawie stażu MNiSW w Instytucie Badań Jądrowych Centre CEA de Saclay we Francji"
9. M. Krzan "Ruch pęcherzyków gazowych w roztworach związków powierzchniowo aktywnych – wzajemne powiązania pomiędzy dynamiczną strukturą warstwy adsorpcyjnej a predkością wynoszenia i innymi parametrami opisującymi ruch pęcherzyka"
10. W.Łasocha "Dyfrakcja proszkowa – opcje i możliwości"
11. A.Micek-Ilnicka, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Kosydar "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacje uczestników z pobytów na szkoleniach na Uniwersytetach w Palermo, Paryżu i Birmingham"
12. M.Mosiąlek "Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacja uczestnika mobilności z udziałem w szkoleniu na Uniwersytecie Wileńskim"
13. M.Mosiąlek, M.Krzan " Mobilność edukacyjna w ramach programu Erasmus+. Relacje uczestników mobilności z pobytów na szkoleniu na Uniwersytecie w Wilnie, Instytucie Chemii Fizycznej Bułgarskiej Akademii Nauk w Sofii i Uniwersytecie nChemii i Technologii w Pradze"
14. A.Pacuła "Kompozyty węglowe 'szyte na miarę' i ich zastosowanie"
15. W.Płaziński "Beyond standard molecular dynamics: enhanced-sampling methods and their application"
16. P.Weroński "Wirująca elektroda dyskowa jako narzędzie do badań cienkich warstw cząstek kulistych"
17. M.Witko "Adam Bielański – Uczony i Nauczyciel", Komitet Chemii PAN, Warszawa 2016
18. M.Witko "Kataliza wokół nas", Instytut Botaniki PAN, Kraków 2016
19. J.Zawała "Bubble collisions with liquid/gas and liquid/solid interfaces - experiment and modelling", Université Libre de Bruxelles, 2016
20. P.Żeliszewska "Adsorpcja fibrynogenu na mikrosferach polistyrenowych"

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. J.Barbasz "Nauka w zabawie, zabawa w nauce"
2. M.Krzan "Zrozumieć pianę - inspiracja w nauce, architekturze i sztuce"
3. A.Micek-Ilnicka "Chemiczne puzzle, czyli świat molekularnych maszyn"

4. D.Rutkowska-Żbik "Woda - co o niej wiemy"
5. M.Szaleniec "Laboratorium szefa kuchni"

UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

PROFESORA

1. P.Nowak
2. T.Pańczyk

DOKTORA HABILITOWANEGO

1. M.Mosiąlek "Reakcja redukcji tlenu w ogniwie paliwowym z elektrolitem ze stałego tlenku z omówieniem własności srebra jako materiału katodowego"
2. J.Zawała "Rola dynamiki ruchu i nanostruktur powierzchniowych w stabilności filmów ciekłych w warunkach dynamicznych – teoria i eksperyment"

DOKTORA

1. K.Handing "Structural and functional studies of serum albumins" (promotor Tomasz Borowski)
2. A.Knack "Biokatalityczne otrzymywanie chiralnych alkoholi z wykorzystaniem dehydrogenazy (S)-1-fenyletanolowej w enancjoselektywnej redukcji ketonów" (promotor Maciej Szaleniec)
3. T.Giela "Mikroskopie elektronowe LEEM i PEEM w badaniach powierzchni i nanostruktur" (promotor Józef Korecki)
4. Tomasz Kruk "Nanostrukturalne filmy polimerowe jako funkcjonalne powłoki i membrany" (promotor Piotr Warszyński)
5. A.Niecikowska "Wpływ surfaktantów kationowych i pH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości" (promotor Kazimierz Małyśa)
6. P.Żeliszewska "Mechanizmy adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach nośników koloidalnych" (promotor Zbigniew Adamczyk)

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

1. 48. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków, 16-18 marca 2016 (B.Sulikowski)
2. 6th Meeting 'X-ray and other techniques in investigations of the objects of cultural heritage', Krakow, May 19th-21st, 2016 (R.Kozłowski, W.Łasocha)

3. 16th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-16, Zakopane, June 19th-23rd, 2016 (M.Witko, D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj)
4. QCM-D Workshop “Functional coatings using QCM-D system: theory and practice”, Krakow, June 30th, 2016 (B.Jachimska)
5. International Workshop “Materials and methods for cost-effective solar cell production” InLinePV Project Workshop, Krakow, November 16th, 2016 (P.Warszyński, R.Socha)

IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. Festiwal Nauki "Czas i przestrzeń", Rynek Główny, Kraków 19-21 maja 2016 (N.Spiridis)
2. Dzień Otwarty IkiFP PAN, Kraków, 25 listopada 2016 (M.Nattich-Rak)

WYRÓŻNIENIA I NAGRODY

1. Status (logo) Human Resources Excellence in Research nadany przez Komisję Europejską
2. Międzynarodowa akredytacja ECTN Chemistry Doctorate Eurolabel prowadzonych przez Instytut Międzynarodowych Studiów Doktoranckich
3. E.Niedzialkowska, roczne stypendium Start 2016 Fundacji na rzecz Nauki Polskiej
4. W.Płaziński, stypendium naukowe dla wybitnych młodych naukowców Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego
5. M.Witko – doktorat honoris causa Politechniki Rzeszowskiej im. Ignacego Łukasiewicza

REPORT of the INTERNATIONAL ADVISORY BOARD (IAB)

Research Activities of 2014-2016

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

Introduction

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

- i) Catalytic materials and processes for sustainable development
- ii) Physics and chemistry of surfaces and nanostructures - experiment and theory
- iii) Nanostructures of soft matter
- iv) Physics and chemistry in cultural heritage protection

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

Impact of IAB previous report recommendations

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

- A long-term strategy, based on the vision of frontiers of research in the area addressed by the Institute, and the possibility to exploit the fundamental knowledge to promote innovation;
- Developing an approach to raise funds and to publish high-quality work;
- An effort in raising the quality of some areas;
- An intensified effort to secure ERC, EU and other international funds and research contracts with companies;
- A policy to encourage international mobility for young and senior staff.

We recognize the effort made in the last three years to sustain the number and quality of publications in high-impact journals.

We approve the effort in setting up an internal evaluation of the performances of the different groups, and use this strategy for stimulating in restructuring and consolidation of the Institute.



1

We positively consider the effort of the Institute for expanding scientific capabilities and achieving the status of leading national research centre KNOW in physical sciences.

Research, education and promotion of science

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

- the Institute is ranked among the top ten Institutes of PAS based on the scientific productivity and quality of young researchers
- sustained number of high impact papers;
- intensified collaboration with several research centres and organization of joint laboratories;
- participation in several consortia, research clusters and international networks including coordination of COST Action CM1101;
- excellent participation in several educational activities, from doctoral programmes to postgraduate schools and collaboration with high schools;
- large number of excellent and successful PhD students;
- remarkable outreach activities.

Transfer of research to application

IAB appreciates the effort made in transferring the results of fundamental research to patents. A further attention to innovation efforts by the research staff of the Institute is encouraged.

Funding aspects

We noticed the decline of the funds from the Polish Ministry of Science and Higher Education. This has been largely compensated by NSC and NCRD funds. The largest part of these funds is for fundamental research, which is consistent with the purpose of the Institute. IAB feels that to expand further the capacities of the Institute it is necessary to secure funds from EU and international programmes and research projects supported by companies. IAB appreciates the large effort made in applying for EU and ERC funds. Although the success was limited, we very much encourage continuing in this direction, including more intense mentoring of young researchers to improve success rate.

Scientific productivity

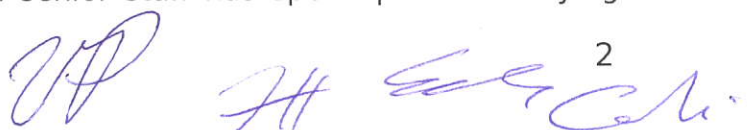
IAB is satisfied with the consolidated scientific productivity, both in respect to quality and quantity. Productivity is significantly above the criteria established by the Ministry of Science and Higher Education.

Personnel policy

Reorganization has increased the opportunities offered to young researchers for leadership and promotion. IAB appreciates the established internal evaluation of the research groups' performances and of the personnel, which has resulted in an improved structure of the Institute.

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

IAB also encourages continuing significant number of young researchers to be trained outside Poland. IAB appreciates that several senior staff has spend periods carrying

 2

out research in foreign Institutes. The Institute should actively promote this policy to maintain scientific health and motivation of students and staff.

Opportunities

The increased participation in consortia, such as SOLARIS (the Polish National Synchrotron), the Life Science and Energy Clusters, the Marian Smoluchowski Krakow Research Consortium "Matter-Energy-Future", E-RIHS PL "Polish Distributed Research Infrastructure for Heritage Science", etc., extend the opportunities for new topics and collaborations in the area of surface, life and material science, and catalysis. The activities in bio-catalysis are promising.

Recommendations

Research and innovation strategy

A long-term strategy, based on the vision of frontiers of research in the area addressed by the Institute, and the possibility to exploit the fundamental knowledge to promote innovation, should be developed and implemented. The strategy should be defined by the Director with the Group Leaders, based on bottom-up approaches with suitable strategies to create the critical mass to address challenging objectives requiring a joint effort.

Scientific quality and funds

IAB appreciates the effort made in consolidating research output. The Institute is now in the position to implement new strategies to strengthen international visibility and attract more research funds.

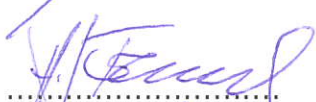
Krakow, 27 February 2017

The International Advisory Board

Gabriele Centi (chairperson)



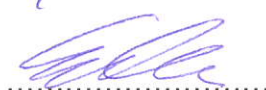
Hajo Freund



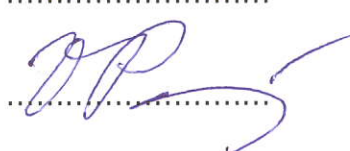
Johann Heider



Elena Mileva



Valentin Parmon



WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

Wypis 1/98/2017

z protokołu 98. posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk – XI. posiedzenia kadencji 2015-2018 w dniu 29.06.2017, dotyczący sprawozdania z działalności naukowej Instytutu w roku 2016

Ad. 6. Sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu za 2016 rok

Dr hab. Tomasz Borowski, prof. IKiFP PAN przedstawił sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu. Przedstawił tematykę 18 zadań statutowych pogrupowanych w następujących działach:

- Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju (9 zadań),
- Fizykochemia powierzchni i nanostruktur – eksperyment i teoria (4 zadania),
- Nanostruktury materii miękkiej (4 zadania),
- Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury (1 zadanie).

Dr hab. Tomasz Borowski, prof. IKiFP PAN poinformował Radę, że działalność statutowa Instytutu została podsumowana na seminarium sprawozdawczym Instytutu, które odbyło się 27 lutego 2017 z udziałem International Advisory Board, a następnie przedstawił i omówił:

a) rodzaje projektów badawczych, realizowanych w ubiegłym roku w Instytucie, wraz ze źródłami ich finansowania: NCN (29), NCBiR (2), MNiSW (3), FNP (1), projekty programu Polsko-Norweskiej Współpracy Badawczej (2), projekty na podstawie umów dwustronnych (1), COST (5, w tym jeden koordynowany przez Instytut),

b) funkcjonowanie i współpracę w ramach KNOW,

c) środki finansowe przeznaczone na poszczególne rodzaje działalności,

d) strukturę zatrudnienia,

e) dorobek naukowy Instytutu:

– rozdziały w książkach	4
– artykuły w czasopismach międzynarodowych (JCR, lista A)	112
– artykuły w innych czasopismach (lista B)	11
– inne publikacje	10
– streszczenia w materiałach konferencyjnych	203
– wydawnictwa nakładem Instytutu (materiały konferencyjne – abstrakty)	2

i jego porównanie z latami poprzednimi oraz patenty i zgłoszenia patentowe,

f) najlepsze publikacje (z nowym osiągnięciem badawczym i artykuł przeglądowy) opublikowane w:

- Angew. Chem. Int. Ed., 55 (2016) 11664-11667,
- Appl. Catal. A, 189 (2016) 252-265,
- ACS Appl. Mater. Interfaces, 8 (2016) 25043-25050,
- Chem. Eur. J., 22 (2016) 2562-2581.

g) udział pracowników w konferencjach naukowych i wykładach,

h) uzyskane tytuły i stopnie naukowe,

i) otrzymane nagrody,

j) zorganizowane konferencje naukowe,

k) zorganizowane imprezy popularno-naukowe,

l) główne osiągnięcia naukowe w roku 2016:

- w ramach projektów/zadań badawczych: „Model adsorpcji jonowych surfaktantów biodegradowalnych” oraz „Innowacyjne katalizatory całkowitego utleniania (projekt NCN OPUS 2013/09/B/ST5/00983 [2014-2017])”

- o znaczeniu ogólnospołecznym lub gospodarczym związane z działalnością naukową: „Sposób wytwarzania stabilnych suspensji nanocząstek srebra o dodatnim ładunku powierzchniowym”,
- zastosowania wyników badań naukowych lub prac rozwojowych o znaczeniu społecznym i gospodarczym; działania zwiększające innowacyjność: „Nowy sposób syntezy kalcyfediolu” oraz „Opracowanie oprogramowania HERIE”,
- rezultaty współpracy międzynarodowej: „Bridging Arrangement, Microelectronic Component and Method for Manufacturing a Bridging Arrangement (zgłoszenie patentowe UK GB 2531760; zgłoszenie patentowe USA, US 2016126202)” oraz “Publiczna baza danych wyników doświadczeń dyfrakcyjnych dla makromolekuł”.

Dyskusja nad przedstawionym sprawozdaniem, w której udział wzięli: prof. Jacek Waluk, prof. Władysław Lasoń, prof. Stanisław Słomkowski, prof. Andrzej Jarzębski, prof. Paweł Kulesza, prof. Małgorzata Witko, prof. Maria Nowakowska, dotyczyła:

- procedury wyboru wyróżnianych publikacji i powiązania ich z tematyką badawczą Instytutu,
- uzyskania przez Instytut statusu HR (Human Resources Excellence in Research nadawany przez Komisję Europejską),
- dobrej kondycji naukowej Instytutu.

Przewodnicząca Rady, zamykając dyskusję zaproponowała wniosek stwierdzający, że Rada przyjmuje sprawozdanie z działalności Instytutu w roku 2016. W jawnym głosowaniu przyjęto jednogłośnie wniosek i sprawozdanie.

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