



**INSTYTUT KATALIZY  
I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI  
POLSKA AKADEMIA NAUK**

**SPRAWOZDANIE  
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU  
W ROKU 2010**



**Kraków, kwiecień 2011**

## **SPIS TREŚCI**

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	<b>5</b>
Zadania badawcze realizowane w roku 2010	<b>9</b>
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2010	<b>15</b>
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2010	<b>21</b>
Działalność statutowa Instytutu	<b>21</b>
Projekty badawcze własne	<b>61</b>
Projekty badawcze promotorskie	<b>83</b>
Projekty badawcze zamawiane	<b>93</b>
Krajowe sieci badawcze	<b>97</b>
Inicjatywa Technologiczna I	<b>103</b>
Projekt „Homing Plus” (FNP)	<b>107</b>
Projekty 6. Programu Ramowego UE	<b>111</b>
Projekty 7. Programu Ramowego UE	<b>117</b>
Projekty EU COST Action	<b>125</b>
Projekty EOG	<b>133</b>
Inne międzynarodowe projekty badawcze	<b>137</b>
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	<b>143</b>
Inne zadania	<b>153</b>
Współpraca z innymi instytucjami i przemysłem w roku 2010	<b>157</b>
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2010	<b>161</b>
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	<b>161</b>
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	<b>193</b>
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	<b>221</b>



# **CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI PAN**

## **Od teorii do eksperymentu i zastosowań**

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie jest jedyną w Polsce instytucją naukową i jedną z ośmiu w świecie, których działalność jest w całości poświęcona badaniom w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni. Instytut prowadzi interdyscyplinarne badania zjawisk zachodzących na granicach fazowych gaz - ciało stałe, gaz - ciecz i ciecz - ciało stałe, łączące istotne aspekty chemii, fizyki, technologii chemicznej, inżynierii materiałowej, a ostatnio także biologii i medycyny. Instytut łączy podstawowe studia teoretyczne i doświadczalne z badaniami o charakterze stosowanym, mającymi zastosowanie w procesach technologicznych.

W Instytucie zatrudnionych jest 108 pracowników, w tym 44 na stanowiskach naukowych. W badaniach uczestniczy też 25 doktorantów.

W roku 2010 (z perspektywą kontynuowania w kolejnych latach) wykonywano następujące tematy działalności statutowej Instytutu:

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych
2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju
3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy
4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów
5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe
6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

Instytut posiada dobre, w niektórych przypadkach unikatowe w skali krajowej, zaplecze aparaturowe, niezbędne do realizowania tak szeroko zakrojonej tematyki badawczej. W miarę potrzeb i możliwości udostępniane jest ono również innym placówkom naukowym. W badaniach wykorzystywana jest także aparatura wspólnych laboratoriów międzyinstytutowych: Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur, Międzyinstytutowego Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej, Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni oraz Polsko-Ukraińskiego Laboratorium Katalizy. Szeroka współpraca z czołowymi ośrodkami naukowymi w kraju i zagranicą pozwala także na dostęp do innej, wysoko wyspecjalizowanej aparatury pomocnej w wykonaniu planowanych zadań.

Działalność badawcza Instytutu jest bardzo szeroka i wszechstronna. Obejmuje projektowanie, syntezę, testowanie oraz praktyczną weryfikację nowych, zaawansowanych materiałów i procesów. W zakresie katalizy heterogenicznej główny wysiłek ukierunkowany jest na rozwijanie nowych, "inteligentnych" materiałów o dobrze zdefiniowanej strukturze i właściwościach dostosowanych do konkretnych reakcji katalitycznych. Badane materiały to m.in. układy tlenkowe o nowych składach i strukturach, materiały nieorganiczne i organiczne o kontrolowanym systemie porów, układy metalicznych nanocząstek na nośnikach, a także odpowiadające im układy modelowe na dobrze zdefiniowanych powierzchniach monokryształów oraz nowe materiały magnetyczne. Procesy katalityczne stanowiące przedmiot badań wpisują się w nurt „chemii zielonej” i są optymalizowane pod kątem obniżenia energochłonności i wyeliminowania lub ograniczenia produktów ubocznych. Przykładem są reakcje selektywnego utleniania i uwodorniania, utleniającego odwodorniania, izomeryzacji węglowodorów, jak również szeroko badane procesy usuwania szkodliwych zanieczyszczeń powietrza. Opis badanych reakcji obejmuje także ich kinetykę i mechanizm.

Badania w zakresie katalizy homogenicznej i enzymatycznej skoncentrowane są na układach bioaktywnych i bionaśladowczych.

Prace badawcze w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych są ukierunkowane na wyjaśnienie mechanizmu tworzenia i stabilności pian, nanocząstek i cząstek koloidalnych i ich oddziaływań, mikroenkapsulacji i biokompatybilności materiałów. Znaczna część badań poświęcona jest opisowi zjawiska adsorpcji. Aspekt aplikacyjny obejmuje m.in. wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych, takich jak nośniki leków lub podstawowe elementy testów diagnostycznych, oraz fizykochemiczną modyfikację powierzchni tworzyw używanych do produkcji implantów lub stentów w celu poprawy ich tolerowania przez organizm.

Prace eksperymentalne są prowadzone w ścisłym związku z badaniami teoretycznymi, w których wykorzystywane są metody chemii kwantowej i modelowanie metodami fizyki ciała stałego, jak również metody mechaniki molekularnej i techniki symulacji Monte Carlo. Zakres badań obejmuje wyjaśnianie mechanizmów reakcji katalitycznych, modelowanie struktur tlenków metali przejściowych, materiałów kompozytowych oraz centrów aktywnych w enzymach, a także opis adsorpcji surfaktantów na powierzchniach międzyfazowych ciecz - gaz i ciecz - ciecz oraz symulacje adsorpcji cząstek polimerowych na homogenicznych i heterogenicznych powierzchniach ciał stałych.

Ważnym kierunkiem badań jest ochrona dziedzictwa kultury, w ramach której prowadzone są studia nad strukturą i właściwościami historycznych materiałów budowlanych i dekoracyjnych, oraz dokonywana jest analiza niszczącego oddziaływania środowiska na zabytki architektury i dzieła sztuki. Pozwala to na zapobieganie niszczeniu zabytkowych obiektów oraz na udoskonalanie materiałów i metody konserwatorskich.

Rezultatem badań prowadzonych w Instytucie, oprócz dokonań poznawczych, są także osiągnięcia aplikacyjne. Od wielu lat jedną ze specjalności Instytutu stanowi katalityczne usuwanie zanieczyszczeń środowiska. Instytut może się w tej dziedzinie poszczycić zarówno patentami na katalizatory, jak i na rozwiązania technologiczne. Jednym z nich jest proces "Swingtherm", pozwalający na eliminację toksycznych wyziewów przemysłowych poprzez ich spalenie do nieszkodliwych produktów, przy minimalnym nakładzie energetycznym. Licencja na to rozwiązanie technologiczne została sprzedana do wielu zakładów w Polsce, Europie, Kanadzie, Chinach i Japonii. Aby wzmocnić transfer innowacji do praktyki, w roku 1995 utworzona została spółka typu spin-off "Katalizator" w celu rozwoju przemysłowych zastosowań układów katalitycznych opracowanych i opatentowanych w Instytucie. W 2006 roku zostało utworzone, dzięki finansowaniu z funduszy Sektorowych Programów Operacyjnych, nowe laboratorium "Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CeZaŚ", które w 2010 roku otrzymało akredytację PCA na 6 procedur badawczych w zakresie zanieczyszczeń emisyjnych.

Wiele dokonań praktycznych ma na swoim koncie grupa zajmująca się ochroną dziedzictwa kultury. Przykładem może być rozpoznanie przyczyn kondensacji pary wodnej niszczącej rzeźby solne w historycznej Kopalni Soli w Wieliczce, dzięki czemu wdrożono tam system klimatyzacji, który całkowicie wyeliminował istniejące zagrożenia. Z kolei badania nad cementami romańskimi, używanymi do dekoracji budowli XIX i początku XX wieku przywróciły wytwarzanie i stosowanie tego materiału w praktyce konserwatorskiej. Ilustracją tego jest odrestaurowany gmach dawnej Akademii Handlowej w Krakowie, stanowiący pierwszą w Europie renowację sztukaterii romańskich. Ostatnio, dzięki poznaniu mechanizmu niszczenia wczesnochrześcijańskich malowideł w Grocie św. Pawła w Efezie, opracowano plan zahamowania zniszczeń przez zastosowanie kontrolowania mikroklimatu wewnątrz grotu.

## **Kształcenie**

Instytut jest wiodącą instytucją tworzącą Międzynarodowe Studium Doktoranckie (wraz z Wydziałem Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej i Wydziałem Chemicznym Politechniki Rzeszowskiej). Studium liczy obecnie 45 słuchaczy. W ramach współpracy z Uniwersytetem Jagiellońskim w Instytucie realizowane są u prace licencjackie i magisterskie z chemii i ochrony środowiska. W roku 2008 uruchomiono dwa projekty finansowane z Funduszy Strukturalnych UE: MPD (Międzynarodowe Projekty Doktoranckie) "Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures", mający na celu finansowanie badań naukowych doktorantów wyłonionych w drodze konkursów oraz o podobnym charakterze ISD (Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie) "Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości" (oba realizowane we współpracy z Akademią Górniczo-Hutniczą) a w roku 2010 dwa kolejne projekty: ISD MOLMED "Nauki Molekularne dla Medycyny" koordynowany przez Instytut oraz TEAM-FNP AMON "Atomic and molecular level devising of functional nanostructures for magnetic and catalytic applications" (we współpracy z Akademią Górniczo-Hutniczą).

## **Współpraca krajowa**

Instytut szczyli się wieloletnią tradycją w organizacji i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i chemii powierzchni w Polsce. Od ponad czterdziestu lat Instytut organizuje cieszące się wielką popularnością w środowisku naukowym, coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne; w roku 2010 odbyła się 42 konferencja z tego cyklu. Instytut koordynuje i uczestniczy w pracach kilku krajowych sieci badawczych, Polskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, Małopolskiej Sieci Centrów Doskonałości "Międzyregionalna Sieć Centrów Badawczych Materiałów dla Nowych Technologii", Kłastrze Life-Science, Konsorcjum "Kataliza w ochronie środowiska: usuwanie zanieczyszczeń ze środowiska, energia odnawialna i czysta energia", Konsorcjum Nanotech, Małopolskim Kłastrze Technologii Informacyjnych, Małopolsko-Podkarpackim Kłastrze Czystej Energii.

Dla rozwoju interdyscyplinarnych badań Instytut utworzył wspólne laboratoria: "Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur" (z Wydziałem Fizyki i Techniki Jądrowej Akademii Górniczo-Hutniczej i Wydziałem Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej), "Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej (z Instytutem Fizjologii Roślin PAN i Wydziałem Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego) oraz Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni (z Instytutem Chemii Fizycznej PAN). Instytut jest też współzałożycielem Narodowego Laboratorium Badania Powierzchni (wspólnie z Instytutem Chemii Fizycznej PAN). W roku 2009 Instytut przystąpił do finansowania dzięki funduszom strukturalnym UE, konsorcjum SPINLAB "Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej".

## **Współpraca międzynarodowa**

Instytut jest szeroko zaangażowany we współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w 50 porozumieniach o współpracy dwustronnej oraz w wielu projektach badawczych Unii Europejskiej. Współpraca z Narodową Akademią Nauk Ukrainy doprowadziła do utworzenia w 1993 roku wspólnego Ukraińsko-Polskiego Laboratorium Katalizy zlokalizowanego w Krakowie i Kijowie.

W latach 2002-2006 Instytut posiadał status Centrum Doskonałości UE "CATCOLL - The Krakow Research Centre for Molecular Catalysis and Soft Matter Chemistry". Działalność CATCOLL wpłynęła na polepszenie integracji z europejską społecznością naukową przez organizację wykładów znanych naukowców, wizyt studyjnych w Polsce oraz wyjazdów słuchaczy studium doktoranckiego na staże do uznanych europejskich centrów badawczych.

W latach 2005-2008 Instytut był koordynatorem projektu UE Transfer of Knowledge "ToK-CATA Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts". Projekt realizowano we współpracy z University of Nottingham, Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, University of Stuttgart, Humboldt University, University of Lund. Projekt realizowano poprzez długoterminowe staże przyjazdowe naukowców z zagranicy do IKiFP PAN oraz wyjazdowe pracowników IKiFP PAN do partnerskich instytucji, a celem było opracowanie i synteza katalizatorów porowatych o właściwościach niezbędnych dla realizacji konkretnych reakcji katalitycznych.

Instytut zaangażowany był także w prace europejskiej sieci badawczej "IDECAT - Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production". IDECAT był projektem typu sieci doskonałości realizowanym w latach 2005-2010 w ramach 6. Programu Ramowego UE i koordynowany jest przez Consorzio Interuniversitario per la Scienza e Tecnologia dei Materiali we Włoszech. Jednoczy 37 laboratoriów z 17 instytutów w 11 krajach (Włochy, Belgia, Czechy, Irlandia, Francja, Polska, Hiszpania, Szwecja, Szwajcaria, Holandia, i Wielka Brytania). Celem projektu IDECAT jest osiągnięcie trwałej integracji pomiędzy głównymi europejskimi instytucjami badawczymi w dziedzinie katalizy heterogenicznej, homogenicznej, biokatalizy przez utworzenie spójnych ram współpracy w zakresie badań, know-how, szkoleń, promocji nauki, rozpowszechnianie umiejętności i transfer technologii pomiędzy różnymi grupami naukowymi z dziedziny katalizy. Wymiernym rezultatem projektu jest utworzony przez wszystkich jego uczestników wirtualny Europejski Instytut Badawczy Katalizy (ERIC).

Instytut realizuje obecnie 16 projektów europejskich, w tym 2 projekty Europejskiego Obszaru Gospodarczego, 4 projekty UE COST Action i 3 projekty ERA-NET. Realizowanych jest także 8 projektów Funduszy Strukturalnych współfinansowanych przez Komisję Europejską. W roku 2010 realizowano 6 projektów 7. Programu Ramowego UE. Na ogłoszone konkursy 7. PR UE przygotowano szereg kolejnych propozycji projektów badawczych i koordynujących.

### **Popularyzacja nauki**

Przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych jest niezbędnym warunkiem budowania aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne, znalazło odzwierciedlenie w inicjatywach na rzecz popularyzacji osiągnięć naukowych. Każdego roku Instytut organizuje Dni Otwarte, podczas których goście mogą wysłuchać wykładów popularnonaukowych, uczestniczyć w widowiskowych eksperymentach przeprowadzanych w laboratoriach i zaznajomić się z profilem badawczym Instytutu. Dni Otwarte skierowane są przede wszystkim do uczniów szkół ponadpodstawowych. O ich popularności wśród krakowskich szkół świadczy fakt, że corocznie odwiedza Instytut ok. 1000 osób.

Inne formy działalności popularyzacyjnej to aktywny udział w organizacji corocznego Festiwalu Nauki na Rynku Głównym w Krakowie, oraz udział pracowników Instytutu w panelach dyskusyjnych, audycjach radiowych i telewizyjnych poświęconych sprawom nauki.

# ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2010

## DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

### 1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

- |  |    |
|--|----|
| 1.1. Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów jako prekursory w preparatyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdziału  | 25 |
| 1.2. Właściwości strukturalne i dynamika w epitaksjalnych nanostukturach metalicznych i tlenkowych badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi   | 26 |
| 1.3. Nanomateriały na podstawie minerałów warstwowych  | 27 |
| 1.4. Nowe perokso-związki Mo(VI), W(VI) i V(V) - synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne   | 28 |
| 1.5. Określenie właściwości elektrycznych i elektrochemicznych roztworów stałych w układach $CeO_2-M_2O_3-CaO$ , oraz $CeO_2-M_2O_3-Nd_2O_3$ , gdzie $M = Sm, Gd$ , pod kątem ich zastosowania w ogniwach paliwowych | 29 |
| 1.6. Właściwości elektrokatalityczne nanostrukturalnych tlenków i kompozytów węglowo-tlenkowych otrzymanych drogą syntezy z materiałów o strukturze hydrotalkitu   | 30 |

### 2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

- |  |    |
|--|----|
| 2.1. Zredukowane sole miedziowe i palladowe heteropolikwasów jako katalizatory bifunkcyjne                   | 33 |
| 2.2. Badanie transestryfikacji triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów na podstawie związków cynku | 34 |
| 2.3. Katalizator tlenkowo-srebrowy do pełnego utleniania związków organicznych                               | 35 |
| 2.4. Transformacja węglowodorów terpenowych na mikro- i mezoporowatych sitach molekularnych                  | 36 |
| 2.5. Układy $Ag-ZnO-(ZrO_2)$ jako katalizatory do uwodornienia $CO_2$  | 37 |
| 2.6. Kationowe makrocykliczne metalokompleksy jako katalizatory utleniania fenolu                            | 38 |
| 2.7. Katalizatory rutenowe do procesów selektywnego uwodornienia   | 39 |

### 3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy

- |  |    |
|--|----|
| 3.1. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych: badania kwantowo-chemiczne  | 43 |
| 3.2. Modelowanie molekularne mechanizmów reakcji enzymatycznych  | 44 |
| 3.3. Właściwości centrów aktywnych w modelowych układów heteropolikwasów - badania metodami klasterowymi i periodycznymi   | 45 |
| 3.4. Teoretyczne modelowanie wpływu oddziaływań elektrostatycznych oraz heterogeniczności energetycznej powierzchni sorbentów na kinetykę i równowagę procesu sorpcji jonów metali oraz protonów         | 46 |
| 3.5. Badania wpływu energii translacyjnej, rotacyjnej oraz mechanizmu rozproszenia energii na współczynnik przyklejenia molekuł wody na powierzchni platyny prowadzone przy użyciu dynamiki molekularnej | 47 |
| 3.6. Badanie zależności między reaktywnością chemiczną a strukturą molekularną reagentów   | 48 |

### 4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów

- |   |    |
|---|----|
| 4.1. Określenie topologii monowarstw białek globularnych na powierzchniach heterogenicznych przy pomocy metody potencjału przepływu, osadzania cząstek koloidalnych oraz mikroskopii oraz AFM | 51 |
|---|----|



4.2. Wpływ siły jonowej i pH na profile prędkości lokalnych pęcherzyków gazowych w roztworach surfaktantów anionowych	52
---	----

## **5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe**

5.1. Cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanocząstkami i proteinami	55
5.2. Modelowanie adsorpcji nanocząstek – teoretyczny opis przypadkowej adsorpcji sekwencyjnej cząstek kulistych z uwzględnieniem krzywoliniowej trajektorii i ruchów Browna	56

## **6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**

6.1. Monitorowanie stanu powierzchni obiektów zabytkowych przy zastosowaniu metod optycznych	59
--	----

## **KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE**

### **Projekty badawcze własne (MNiSW)**

1. N204 089 32/2633 [2007-2010] Mechanizm działania katalizatorów "nano-Au/tlenek" w reakcjach utleniania CO	63
2. N204 122 32/3142 [2007-2010] Zastosowanie makrocyclicznych kompleksów metali przejściowych w samoorganizujących się układach do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów	64
3. N N204 149433 [2007-2010] Wpływ atomu centralnego (P, Si) oraz atomu addenda (W, Mo) w solach srebrnych heteropolikwasów o strukturze Keggina na bezpośredni rozkład tlenków azotu NO <sub>x</sub>	65
4. N N204 248634 [2008-2011] Kompleksy surfaktantów kationowych o złożonej strukturze cząsteczkowej z polimerami jonowymi jako elementy budowy nanostruktur	66
5. N N204 2490 4 [2008-2011] Badanie heterogenizowanych chiralnych kompleksów rutenu w katalitycznym enancjoselektywnym uwodornieniu ketonów	67
6. N N202 248535 [2008-2011] Oddziaływanie wymienne typu "exchange-bias" w układach epitaksjalnie osadzanych metali 3d i 4f na polarnych i nie-polarnych podłożach tlenków metali przejściowych	68
7. N N301 093036 [2009-2011] Molekularne mechanizmy determinujące specyficzność enzymów zależnych od 2-oksoglutatanu	69
8. N N204 028536 [2009-2012] Opracowanie metody tworzenia biologicznie aktywnych multiwarstw zawierających polielektrolity-białka-dendryty	70
9. N N507 269936 [2009-2012] Nowe nanostrukturalne materiały węglowe, tlenkowe oraz kompozyty węglowo-tlenkowe do budowy superkondensatorów	71
10. N N105 278536 [2009-2012] Emisja akustyczna do monitorowania obiektów muzealnych jako uniwersalna metoda prewencji konserwatorskiej	72
11. N N523 451336 [2009-2011] Kontrolowana adsorpcja jako metoda zapobiegania zanieczyszczeniu środowiska w wyniku utleniania siarczków metali	73
12. N N204 347737 [2009-2012] Teoretyczna i eksperymentalna analiza porowatości wielowarstwowych kulistych cząstek koloidalnych	74
13. N N204 026438 [2010-2013] Nowa metoda ilościowego opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych	75
14. N N204 291238 [2010-2012] Modelowanie teoretyczne kinetyki i równowagi procesów sorpcji jonów metali ciężkich na materiałach pochodzenia biologicznego	76

15. N N204269038 [2010-2013] Biokatalityczna synteza chóralnych alkoholi alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenowi - teoria i eksperyment -	77
16. N N204 269238 [2010-2013] Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami	78
17. N N507 616638 [2010-2013] Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych SOFC pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro	79
18. N N204 546439 [2010-2012] Nowe metody dyfraktometrii proszkowej w badaniach faz częściowo uporządkowanych, nanometrycznych oraz materiałów o obniżonej wymiarowości	80
19. N N204 546639 [2010-2013] Stabilność, funkcjonalność i mechanizm tworzenia wielowarstwowych struktur polimerowo-kazeinowych	81

### **Projekty badawcze promotorskie (MNiSW)**

1. N N204 2145 33 [2007-2010] Osadzanie modelowych mikrokapsulek na powierzchniach metalicznych modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitów	85
2. N N205 0189 34 [2008-2011] Wpływ modyfikacji gęstości elektronowej katalizatora na jego aktywność w procesach utleniania węglowodorów	86
3. N N204 2559 34 [2008-2010] Enkapsulacja substancji aktywnych w rdzeniach emulsyjnych	87
4. N N204 166336 [2009-2011] Określenie konformacji wybranych białek w roztworach wodnych oraz na powierzchniach międzyfazowych o kontrolowanym stopniu heterogeniczności	88
5. N N204 279937 [2009-2011] Właściwości fizykochemiczne i aktywność katalizatorów hybrydowych do jednoetapowej syntezy eteru dwumetylowego z gazu syntezowego	89
6. N N204 137537 [2009-2011] Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek i wybranych białek na powierzchniach granicznych wyznaczone przy pomocy badań elektrokinetycznych oraz mikroskopii AFM	90
7. N N204 179439 [2010-2012] Wpływ surfaktantów kationowych i PpH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości	91

### **Projekty badawcze zamawiane MNiSW)**

1. PBZ-MEiN-2/2/2006 [2007-2010] Chemia perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla	95
2. PBZ-MNiSW-01/I/2007 [2008-2010] Badania właściwości fizykochemicznych warstw pasywnych na stopach aluminium, magnezu i tytanu oraz powłok stopowych Zn-Ni, Zn-Co, Sn-Zn, Co-P i Ni-P na stalach	96
3. OR00003605 [2008-2010] Sorbent nanostrukturalny do likwidacji skażeń chemicznych	

### **Krajowie sieci badawcze**

1. EKO-KAT Innowacyjne materiały katalityczne w ochronie ekosystemu (KOORDYNACJA)	
2. SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce (KOORDYNACJA)	99
3. MANAR Nowe Materiały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności (KOORDYNACJA)	
4. PV-TECH Rozwój nowych technologii i technik badawczych w dziedzinie krzemowych fotoogniw	100
5. BIONAN Molekularne mechanizmy oddziaływań w nanoukładach biologicznych oraz w układach aktywnych biologicznie modyfikowanych nanocząstkami	101

6. ARTMAG Nanostruktury magnetyczne do zastosowania w elektronice spinowej

### **Inicjatywa Technologiczna I (NCBiR)**

1. Opracowanie nowej bezopdadowej technologii otrzymywania cykloheksanolu/  
/cykloheksanonu (półproduktów do syntezy Nylonu 6 i/lub Nylonu 66) z benzenu  
poprzez cykloheksen [2008-2010] **105**

### **Projekt Homing Plus (FNP)**

1. Structure and Electric Properties of the Composite Films Containing Conductive  
Nanoparticles [2010-2012] **109**

## **ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE**

### **Projekty 6. Programu Ramowego UE**

1. EC 6<sup>th</sup> FP IDECAT [2005-2009] Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a  
Sustainable Production (NoE) **113**
2. EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MATERA Projekt NANOMEDPART [2007-2010] Multifunctional  
Particulate System for Nanomedicine (SPR-KOORDYNACJA) **114**
3. EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MNT Projekt PARFUN [2008-2011] Nanoscale Surface Treatments  
to Functionalise Polymer Particles for Electronic Application (SPR) **115**
4. EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MNT Projekt NANOREP II [2008-2011] Multifunctional Surface  
Coatings and Highly Scratch Resistant Plactic Parts (SPR) **116**

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

1. EC 7<sup>th</sup> FP SCP7-GA-2008-218447 InGAS [2008-2011] Integrated Gas Powertrain –  
Low Emission, CO<sub>2</sub> Optimised and Efficient CNG Engines for Passenger Cars and  
Light Duty Vehicles (CP) **119**
2. EC 7<sup>th</sup> FP CP-IP 229183-2 NEXT-GTL [2008-2011] Innovative Catalytic Technologies  
& Materials for Next Gas to Liquid Processes(IP) **120**
3. EC 7<sup>th</sup> FP MUST [2008-2012] Multi-level protection of materials for vehicles by  
"smart" nanocontainers (CP) **121**
4. EC 7<sup>th</sup> FP 212939 SMOOHS [2008-2011] Smart Monitoring of Historic Structures (FRP) **122**
5. EC 7<sup>th</sup> FP 226898 ROCARE [2009-2012] ROman Cements for Architectural REstoration  
to new high standards (CP) **123**
6. EC 7<sup>th</sup> FP CP-IP 228867-2 [2009-2013] F<sup>3</sup> Factory Flexible, Fast and Future Factory  
- European Chemistry Consortium Begins the Journey into the Future of Production (IP) **124**

### **Projekty EU COST Action**

1. EC COST D36 [2006-2011] Molecular Structure-Performanece Relationships  
at the Surface of Functional Materials **127**
2. EC COST D43 [2006-2011] Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology **128**
3. EC COST IE0601 [2006-2011] Wood Science for Conservation of Cultural  
Heritage **129**
4. EC COST P21 [2006-2010] Physics of Droplets **130**

## **Projekty Mechanizmu Finansowego EOG**

1. PL0084 [2007-2010] NOMRemove Effective Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment **135**
2. PL0086 [2007-2010] Establishing Standards for Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood **136**

## **Inne międzynarodowe projekty badawcze**

1. GDRE Francja [2007-2010] Enzymes as Nanotools. Development of a new, enzyme-based technology for engineering selectively permeable, nano-structured membranes **139**
2. GDRI Francja [2007-2010] Catalysis for Environment: Depollutiation, Renewable Energy and Clean Fuels
3. Projekt międzyrządowy Polski i Austrii [2009-2010] Monowarstwy Fe/W(110): adsorpcja i magnetyzm **140**
4. Projekt Polonium [2010-2011] Epitaksjalne nanostruktury, metaliczne i tlenkowe, badane przy użyciu jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego **141**

## **PROJEKTY FUNDUSZY STRUKTURALNYCH UE**

1. SPO IG 1.1.2 [2008-2012] MPD Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures **145**
2. PO KL 4.1.1 [2009-2015] ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości **146**
3. PO IG 2.2 [2009-2011] SPINLAB Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do zastosowań w elektronice spinowej **147**
4. PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym **148**
5. PO IG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO Funkcjonalne nano- i mikrocząsteczki – synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach **149**
6. PO IG 2.1.1 [2009-2014] VOX Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych **150**
7. PO IG 1.1 [2010-2013] TEAM-FNP AMON Atomic and Molecular Level Devising of Functional Nanostructures for Magnetic and Catalytic Applications
8. PO KL 4.1.1 [2010-2015] ISD NANOMED Nauki Molekularne dla Medycyny **151**

## **INNE ZADANIA**

1. Opracowanie nowego wydania (VI) podręcznika uniwersyteckiego "Podstawy Chemii Nieorganicznej" **155**
2. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ **156**



# SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2010

## W ROKU 2010:

realizowano:	6 tematów statutowych – 24 zadania badawcze 31 projektów badawczych (grantów) MNiSW, NCBiR, FNP (w tym 7 promotorskich, 3 zamawiane) 10 projektów programów ramowych Unii Europejskiej (w tym: 4 projekty 6. PR i 6 projektów 7. PR), 1 projekt koordynowany 2 projekty Mechanizmu Finansowego EOG 4 projekty UE COST Action 4 inne projekty międzynarodowe 8 projektów Funduszy Strukturalnych UE
opublikowano:	1 książkę (podręcznik akademicki) 11 prac przeglądowych i rozdziałów w monografiach 98 prace naukowych drukowanych w czasopismach naukowych o cyrkulacjimiędzynarodowej (oraz 10 ogłoszonych elektronicznie) 3 prac w innych w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji oraz w pismach popularno-naukowych 12 prac w recenzowanych materiałach konferencyjnych 171 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	4 książki (w tym 3 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN)
wyłączono i zaprezentowano:	94 referaty i komunikaty (w tym 23 referaty plenarne i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 160 posterów
uzyskano: zgłoszono	1 patent 2 zgłoszenia patentowe (1 za granicą)
we współpracy z zagranicą:	realizowano 27 tematów opublikowano 44 wspólne prac w czasopismach naukowych i 3 w recenzowanych materiałach konferencyjnych ogłoszono 37 komunikatów w materiałach konferencyjnych zgłoszono 1 zgłoszenie patentowe zrealizowano 169 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę z zagranicy przyjechało 40 osób
zorganizowano:	10 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki
tytuł profesora	uzyskała 1 osoba
stopień doktora habilitowanego	uzyskały 2 osoby
stopień doktora:	uzyskało 5 osób



## WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2010

### **Określenie topologii białek globularnych na powierzchniach heterogenicznych przy pomocy metody potencjału przepływu, osadzania cząstek koloidalnych oraz mikroskopii AFM**

(prof. Zbigniew Adamczyk, mgr Monika Wasilewska, dr Małgorzata Nattich, dr Jakub Barbasz, dr Barbara Jachimska)

Określono kinetykę i mechanizm adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach międzyfazowych, jednego z najważniejszych białek osocza krwi, odpowiedzialnego za zjawiska krzepliwości. Zastosowano bezpośrednie metodyki pomiarowe, takie jak metoda AFM, oraz metoda elektrokinetyczna (potencjału przepływu), pozwalająca na pomiary w warunkach *in situ*. Wykazano, że adsorpcja fibrynogenu zachodzi według mechanizmu nieodwracalnego, w orientacji płaskiej, z szybkością kontrolowaną transportem cząsteczek wewnątrz suspensji (dyfuzją). Uzyskane wyniki doświadczalne opisano ilościowo rozwiniętym przez nas modelem teoretycznym, wykazując równocześnie, że dotychczas stosowany model Gouya-Chapmana, postulujący znaczne deformacje cząsteczek białka, jest nieadekwatny. Dodatkowo, strukturę warstewek adsorpcyjnych fibrynogenu i rozkład ładunku elektrycznego określono w precyzyjny sposób przy pomocy metody wzmocnienia koloidalnego. W tym celu przeprowadzono pomiary kinetyki osadzania modelowych cząstek koloidalnych o ujemnym i dodatnim ładunku powierzchniowym, co pozwoliło na jednoznaczne określenie pokrycia fibrynogenu. Uzyskane wyniki interpretowano ilościowo w oparciu o nowy model teoretyczny, uwzględniający fluktuacje gęstości ładunku elektrycznego, uzyskując ilościową zgodność.

Wykazano, że dotychczas stosowana teoria DLVO, zakładająca równomierny rozkład ładunku jest nieadekwatna. Wyniki te pozwoliły również na opracowanie precyzyjnej metody wyznaczania stężenia białek w roztworach wodnych i na powierzchniach granicznych.

### **Nowe spojrzenie na adsorpcję i aktywację substratu przez centra kationowe w zeolitach: perspektywa ETS-NOCV**

(prof. Ewa Broclawik, dr Paweł Rejmak)

Procesy przeniesienia ładunku towarzyszące adsorpcji i ich wpływ na aktywację małych cząsteczek (eten, etyn i formaldehyd) przez kationowe centra  $\text{Cu}^+$  i  $\text{Ag}^+$  w zeolicie ZSM-5 zostały przeanalizowane metodą ETS-NOCV (Naturalne Orbitale Wartościowości Chemicznej) w modelach uzyskanych z obliczeń QM/MM. Analiza ta pozwala rozłożyć różnicową gęstość elektronową na niezależne kanały transferu elektronów towarzyszące tworzeniu wiązania, obrazujące przepływy ładunku pomiędzy fragmentami. Pokazano, że, dominujące kanały przepływu pomiędzy cząsteczką a centrum kationowym to  $\pi^*$ -donacja zwrotna z orbitali d metalu oraz  $\sigma$ -donacja z substratu do kationu. Alternatywny wybór fragmentów ({kation i związany substrat} oraz {sieć}) wyróżnił kanały przepływu elektronów z tlenów sieciowych do kationu o dwu różnych symetriach: przeciwstawny  $\sigma$ -donacji i wspomagający  $\pi^*$ -donację zwrotną. Drugi proces wspomaga aktywację cząsteczki, natomiast pierwszy z nich osłabia zdolności aktywacyjne centrum w stosunku do wolnego kationu. Dlatego aktywność centrum wynika z wpływu sieci na równowagę przeciwstawnych kanałów przepływu ładunku pomiędzy kationem a cząsteczką. Analiza ilościowa tych efektów pokazała, że dla  $\text{Cu(I)}$  wzrost aktywacji na skutek zwiększenia  $\pi^*$ -donacji zwrotnej kompensuje spadek aktywacji spowodowany blokowaniem  $\sigma$ -donacji, lecz nie jest tak dla  $\text{Ag(I)}$ . Dlatego sieć zeolitu, działająca jako rezerwuar elektronów może wspomagać ( $\text{Cu}^+$ ) jak i pogarszać ( $\text{Ag}^+$ ) aktywność centrum kationowego. Wniosek ten powinien pomóc w precyzyjnym projektowaniu nowych katalizatorów.



## Sposób suszenia modyfikowanego montmorillonitu służącego jako nośnik katalizatora palladowego do utleniania zanieczyszczeń organicznych zawierających chlor [patent PL 199571]

(prof. Krzysztof Bahranowski, prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Tadeusz Machej, dr Alicja Michalik, mgr Robert Janik, dr Halina Piekarska-Sadowska, mgr Janusz Janas)

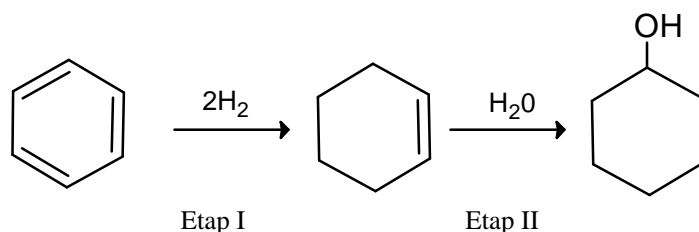
Patent jest rezultatem współpracy między Instytutem Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN a Wydziałem Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH w zakresie projektowania i syntezy nowych materiałów katalitycznych na podstawie minerałów warstwowych. W jej wyniku opracowano skuteczny katalizator do oczyszczania powietrza z toksycznych chlorowcopochodnych organicznych, w drodze pełnego katalitycznego utleniania. Kluczowym wyzwaniem dla takiego katalizatora jest odporność na korodujące działanie chlorowodoru, który jest jednym z produktów reakcji. Wykazano, że właściwości takie ma katalizator palladowy na nośniku otrzymanym przez modyfikację naturalnego montmorillonitu w drodze podpieranania, czyli wprowadzania do przestrzeni międzywarstwowych hydroksytlenowych oligomerów tytanowych lub cyrkonowych, na co uzyskano patent w roku 2008. Dalsze badania związane były z określeniem czynników decydujących o rozwinięciu i stabilności porowatej struktury podpieranego montmorillonitu. Wykazano, że zastąpienie konwencjonalnego suszenia polegającego na odparowaniu wody w temperaturze około 100°C, przez prowadzenie procesu usuwania wody przez sublimację w temperaturze poniżej punktu jej krzepnięcia (od -60 do -80°C), pozwala na otrzymanie nośnika o lepszej dyspersji podpórek, a w dalszej kolejności także lepszej dyspersji fazy aktywnej. Wynika to z faktu, że w trakcie konwencjonalnego odparowywania wody z przestrzeni międzywarstwowych, podpierające oligokationy mogą w nich migrować tworząc większe klastery, natomiast zamrożenie struktury zapobiega dyfuzji oligomerów, które po odsublimumaniu wody pozostają w takim stanie rozproszenia jak bezpośrednio po syntezie w środowisku wodnym. Otrzymane katalizatory zostały przetestowane w ramach realizacji projektu EUREKA CHLORCAT w firmie ELCOM (Republika Czeska). Wykazano, że układy suszone sposobem wg wynalazku przewyższają swą aktywnością katalizatory suszone w sposób konwencjonalny.

## Opracowanie nowej bezodpadowej technologii otrzymywania cykloheksanolu/ cykloheksanenu (półproduktów do syntezy Nylonu 6 i Nylonu 66) z benzenu poprzez cykloheksenu

(projekt Inicjatywy Technologicznej 1 - NCBiR)

(prof. Ewa Serwicka-Bachranowska, dr Jan Połtowicz, dr Katarzyna Pamin)

Celem projektu było opracowanie metody produkcji cykloheksanolu z benzenu. Metoda jest atrakcyjna, ponieważ praktycznie nie powstają produkty uboczne - tworzący się obok cykloheksenu cykloheksan jest poszukiwanym surowcem chemicznym.



W pierwszym etapie opracowano metodę syntezy katalizatora rutenowego do uwodornienia benzenu do cykloheksenu oraz optymalizowano przebieg tego procesu. Drugi etap polegał na optymalizacji uwodnienia cykloheksenu do cykloheksanolu na katalizatorze zeolitowym. Ostatnim etapem było opracowanie projektu procesowej instalacji pilotowej produkcyjno-doświadczalnej syntezy cykloheksanolu z benzenu poprzez cykloheksen o zdolności ok. 1000 ton/rok

w przeliczeniu na cykloheksanol. Nowa technologia jest rezultatem współpracy Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN z Instytutem Chemii Przemysłowej w Warszawie i Biurem Projektów Zakładów Azotowych BIPROZAT w Tarnowie.

## **INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2010:**

W roku 2010 zorganizowano 19 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 27 października 2010**

Główną ideą zorganizowania w dniu 27 października 2010, corocznego, siódmego z kolei Dnia Otwartego Instytutu było przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych jest niezbędnym warunkiem budowania aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne.

W imprezie wzięło udział około 1200 osób. Odwiedzający mieli okazję wysłuchać następujące wykłady:

- A. Bielański "Jak nie święci garnki lepią ?"
- Ł. Bratasz "Globalne ocieplenie - zabytki w niebezpieczeństwie"
- E. Jarek "Od ziółka do mikrokapsułki - nowoczesnego nośnika leków i nie tylko ..."
- E. Młynczak, T. Giela "Jak działają wyświetlacze - od kineskopu do e-papieru"
- J. Szaleniec, M. Szaleniec "Enzymy - biokatalizatory życia"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Materia od środka
- Otrzymywanie paliw ciekłych - jeśli nie z ropy to jak?
- Ciekawe doświadczenia - liofilizacja, czyli co łączy inkaskie mumie, katalizatory i żywność dla astronautów
- Produkty wybuchu wulkanu i malowidła zaginionych miast badane metodą dyfrakcji rentgenowskiej
- Ciekawe doświadczenia - temperatura, ciśnienie i my
- Powierzchnia, cienkie warstwy i nanostruktury
- Jak działają surfaktanty ?
- W głębi nanoświata
- Ciekawe doświadczenia - jak fizyka spotyka się z chemią?
- Mikro- i nanoświat widziany w elektronowym mikroskopie skaningowym
- Kataliza pod wysokim ciśnieniem - czyli jak ciśnienie i temperatura wpływają na przebieg procesów chemicznych?
- Ciekawe doświadczenia - energia i światło

### **Wykłady popularno-naukowe**

- A. Bielański "Kilka kartek z historii chemii: prorocy i szczęściarze", Festiwal Nauki 'Technologia-Sztuka-Życie', Kraków
- A. Bielański "Pierwiastki we Wszechświecie", Zjazd Absolwentów Chemii UJ, Kraków

- R. Kozłowski "Problemy ogrzewania wielkokubatorowych obiektów zabytkowych", Konferencja 'Obiekty zabytkowe i ich otoczenie: konserwacja, renowacja, zagospodarowanie terenu. Wybrane problemy z dziedziny konserwacji zabytków', Nysa

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

- International Workshop 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo, February 18<sup>th</sup>-19<sup>th</sup>, 2010 (R. Kozłowski, Ł. Bratasz)
- MUST EC 7<sup>th</sup> FP Project Workshop, Krakow, March 10<sup>th</sup>, 2010 (P. Warszyński)
- XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 15-17 marca 2010 (B. Sulikowski).
- Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow, March 17<sup>th</sup>-18<sup>th</sup>, 2010 (P. Nowak)
- Seminarium Klaster Life Science, Kraków, 30 marca 2010 (E.Serwicka-Bahranowska)
- International Workshop 'Modeling Mechanical Behaviour of Wooden Cultural Objects', Krakow, April 12<sup>th</sup>-13<sup>th</sup>, 2010 (Ł. Bratasz)
- Warsztat 'Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach'; Warszawa, 20 kwietnia 2010, (R. Kozłowski)
- 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków, May 13<sup>th</sup>-16<sup>th</sup>, 2010 (R. Kozłowski, W. Łasocha)
- US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces'; Krakow, June 6<sup>th</sup>-10<sup>th</sup>, 2010 (Z. Adamczyk)
- 10<sup>th</sup> Pannonian International Symposium on Catalysis, Krakow, August 29<sup>th</sup>-September 2<sup>nd</sup>, 2010 (M. Derewiński)

## **DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU**



# **1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych**



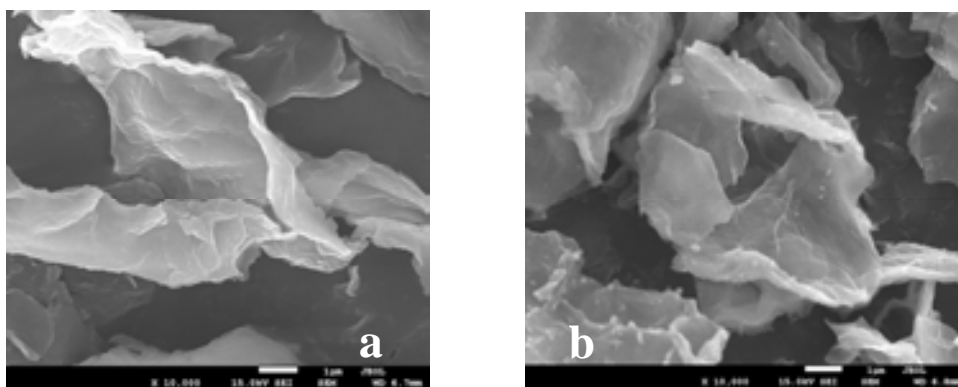
## 1.1. Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów jako prekursorzy w reparażyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdziału

(dr hab. Mirosław Derewiński prof. IKiFP PAN, mgr Jerzy Podobiński)

Celem badań było otrzymanie nowych materiałów na drodze sieciowania nanocząstek zeolitu (tzw. cząstki protozeolityczne) w warstwowe struktury mezoporowate. Zastosowana preparatyka może być efektywną metodą generowania centrów kwasowych w amorficznych materiałach o hierarchicznej strukturze porowatej. Klasterzy protozeolityczne zeolitu typu MFI (zawierające atomy Al lub Fe) zostały wykorzystane jako elementy strukturalne w preparatyce takich układów.

Syntezę nanoklasterów typu MFI prowadzono w warunkach zapewniających otrzymanie jednorodnych zawiesin nanocząstek. Wielkość otrzymanych nanoklasterów zawierających atomy Al i zsyntezowanych w temperaturze 50°C, wynosiła 4-6 nm, podczas gdy zawierających Fe i przygotowanych w temperaturze 100°C wahała się w granicach od 13 do 18 nm. Obecność pasma  $\sim 550\text{ cm}^{-1}$  w widmie FTIR preparatów potwierdziła obecność większych, uporządkowanych struktur (tzw. SBU, *Secondary Building Units*) zawierających charakterystyczne dla zeolitu typu MFI, pierścienie pięcioczłonowe.

Materiały mezoporowate (PMM, tj. *Protozeolitic Mesoporous Materials*) zostały otrzymane na drodze usieciowania cząstek protozeolitych, zawierających atomy Al lub Fe, w wodnym roztworze surfaktanta (heksadecyloamina, HDA). Analiza mikroskopowa (SEM, TEM) potwierdziła warstwową budowę zsyntezowanych preparatów. Otrzymane materiały mezoporowate zostały scharakteryzowane przy zastosowaniu technik: XRD, SEM, DRUV/VIS, TEM,  $^{27}\text{Al}$  MAS NMR, FTIR (właściwości kwasowe) oraz przez sorpcję  $\text{N}_2$ .



Rys. 1. Zdjęcia SEM mezostrukturalnych materiałów zawierających Al (a) oraz Fe (b)

Analiza izoterm adsorpcji/desorpcji  $\text{N}_2$  wykazała dużą o powierzchnię właściwą BET ( $909 - 1167\text{ cm}^{-1}$ ) oraz obecność w strukturze preparatów PMM mezoporów o średnicy rzędu 2.5-3 nm.

Wyniki pomiarów  $^{27}\text{Al}$  MAS NMR kalcynowanych preparatów serii Al-PMM wykazały, że niemal cały glin obecny w strukturze jest skoordynowany tetraedycznie i może generować kwasowe centra aktywne. Zostało to potwierdzone wynikami badań właściwości kwasowych z wykorzystaniem adsorpcji/desorpcji pirydyny, monitorowanej techniką FTIR. Z drugiej strony analiza materiałów typu Fe-PMM techniką DRUV/VIS wykazała, że atomy Fe występują głównie w koordynacji oktaedrycznej i nie generują kwasowości protonowej w preparatach tej serii.

Wnioski odnośnie różnej koordynacji i otoczenia strukturalnego atomów Al i Fe w otrzymanych warstwowych materiałach mezoporowatych zostały potwierdzone wynikami testów katalitycznych (izomeryzacja  $\alpha$ -pinenu w fazie ciekłej).



## 1.2. Właściwości strukturalne i dynamika w epitaksjalnych nanostukturach metalicznych i tlenkowych badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi

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

Przebadano szereg cienkowarstwowych podłoży tlenkowych, takich jak MgO, CoO, FeO, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, które są idealnymi nośnikami dla metalicznych nanostruktur otrzymywanych poprzez samoorganizację na podłożach o specyficznej strukturze. Opracowano technologię preparatyki podłoży tlenkowych trzema metodami: przez utlenianie rodzimego metalu, przez reaktywne nanoszenie metalu w atmosferze tlenu metodą MBE oraz przez nanoszenie tlenku odparowanego w wyniku bombardowania wiązką elektronów. Na szczególne podkreślenie zasługuje stabilizacja tlenku żelaza FeO o orientacji (111) do grubości kilku nanometrów. Stabilizacja polarnej powierzchni tlenku metalu przejściowego o strukturze NaCl nie była do tej pory znana w literaturze, a osiągnięcie to ma istotne znaczenie dla badań modelowych katalizatorów metalicznych na podłożach tlenkowych.

Przeprowadzono badania trójwarstw Fe/MgO/Fe (typowy układ złącza tunelowego) pod kątem właściwości strukturalnych (morfologia warstw granicznych) i magnetycznych, takich jak występowanie anizotropii prostopadłej oraz zależność siły sprzężenia międzywarstwowego od grubości przekładki MgO. Pomiary STM pokazały, że już monowarstwa MgO naniesiona na Fe(001) jest topograficznie ciągła. Jej ciągłość związana jest z równoczesnym formowaniem się fazy tlenkowej żelaza (FeO), co stwierdzono za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji. Z drugiej strony, gdy następnie Fe jest nanoszone na MgO, co prowadzi do powstania kompletnego złącza tunelowego, interfejs Fe/MgO jest chemicznie ostry. W tak otrzymanym złączu, za pomocą magnetoptycznego efektu Kerra, stwierdzono antyferromagnetyczne sprzężenie pomiędzy warstwami Fe nawet dla najcieńszej przekładki MgO (~2 Å).

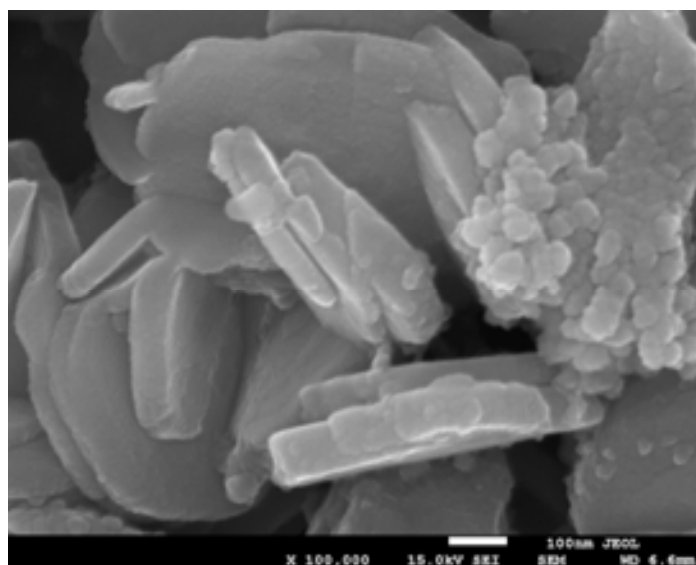
Proces otrzymywania samo-organizujących nanostruktur magnetycznych wymaga dobrze zdefiniowanych podłoży o określonym wzorze powierzchniowym, służącym jako matryca dla samo-organizacji. Wykorzystanie podłoży monokrystalicznych monokryształów danego materiału wiąże się najczęściej z koniecznością żmudnego procesu czyszczenia powierzchni przez jej bombardowanie jonami i długotrwałe cykle wygrzewania. Alternatywnym podejściem w badaniach nanostrukturalnych jest wykorzystanie powierzchni metalu wysokotopliwego, które skraca czasy wymagane do uzyskania czystej powierzchni i umożliwia sprawniejszą preparatykę próbek. Wykorzystując metody eksperymentalne takie jak STM i LEED (dyfrakcja elektronów niskoenergetycznych) zoptymalizowano preparatykę warstw złota na powierzchni wolframu (110) jako podłoża, w celu uzyskania powierzchni Au(111) z charakterystyczną dla niej rekonstrukcją typu "herringbone". W trakcie badań określono wpływ zadanych warunków preparatyki takich jak temperatura depozycji czy ilość nanoszonego materiału na morfologię warstw złota. Analizowano dalekozasięgowe porządkowanie się jednokierunkowych domen rekonstrukcji, jak również określono wpływ defektów powierzchniowych na przebieg jej rzędów. Istotnym osiągnięciem było zlokalizowanie i wytłumaczenie tworzenia się uporządkowanych zgrupowań dyslokacji śrubowych, które oddziałują z rekonstrukcją powierzchniową i modyfikują jej kierunkowość.

Wykorzystując uzyskaną anizotropowo zrekonstruowaną powierzchnię Au(111) zbadano jej wpływ na nukleację i wzrost na niej innych metali: kobaltu i srebra. Wyniki tych badań zostały podsumowane w pracy magisterskiej Tomasza Gieli "Otrzymywanie nanostruktur metali (Au, Ag, Co) na powierzchni W(110) pod kątem inżynierii anizotropii magnetycznej".

### 1.3. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Małgorzata Zimowska, dr inż. Alicja Michalik-Zym, dr Roman Dula, dr Elżbieta Bielańska, mgr inż. Daria Napruszewska)

Układy tlenkowe otrzymane z prekursorów typu hydrotalkitu charakteryzują się nanokrystaliczną budową i wysoką dyspersją pierwiastków składowych, dzięki czemu stanowią bardzo atrakcyjne materiały katalityczne. Właściwości prekursora hydrotalkitowego zależą w zasadniczym stopniu od warunków preparatyki. Celem pracy była ocena wpływu stężenia reagentów na właściwości hydrotalkitu Cu-Mn-Al (1:2:1), często wykorzystywanego jako prekursor katalizatorów. Węglanowe formy hydrotalkitów otrzymano metodą współstrącania w warunkach stałego pH=9, w temperaturze 55°C. We wszystkich eksperymentach stosowano mieszaninę soli azotanowych zawierającą odpowiednie kationy w ilości:  $\text{Cu}^{2+}$ -0,01 M,  $\text{Mn}^{2+}$ -0,02 M,  $\text{Al}^{3+}$ -0,01 M. Przygotowano dwie serie hydrotalkitów: a) stosując stałą ilość węglanu sodu (0,018 M) a zmieniając objętość wody użytej do przygotowania roztworów, b) zachowując stałą objętość użytej wody a zmieniając ilość  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ . Wyniki analiz XRD wykazały obecność dobrze wykrystalizowanej fazy hydrotalkitu CuMnAl we wszystkich badanych preparatach oraz domieszki fazy rodochrozytu  $\text{MnCO}_3$ . Rys. 1 pokazuje obraz SEM, na którym widoczne są dobrze wykształcone płytki hydrotalkitu współistniejące z drobnoziarnistym rodochrozytem. Z przeprowadzonych badań wynika, iż wzrost ilości wody użytej w trakcie syntezy powoduje wzrost krystaliczności fazy hydrotalkitu i prowadzi do większego uporządkowania w obrębie warstw hydrotalkitu. Wpływa także na zwiększenie zawartości dobrze wykrystalizowanej fazy rodochrozytu. Wzrost ilości węglanu użytego podczas syntezy preparatów, powoduje spadek krystaliczności fazy hydrotalkitu i wpływa na zwiększenie się ilości fazy słabo wykrystalizowanego rodochrozytu. Uzyskane wyniki mają zasadnicze znaczenie dla syntezy materiałów katalitycznych, ponieważ obecność rodochrozytu powoduje, że w mieszaninie tlenków otrzymanych w wyniku rozkładu termicznego, obok CuO i spineli obecne są silnie rozproszone tlenki Mn, co, w zależności od rodzaju reakcji katalitycznej, może być pożądane lub nie.



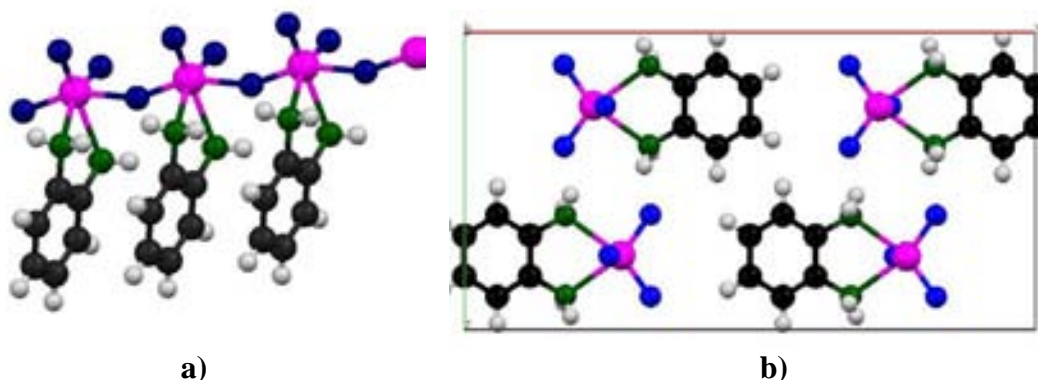
Rys. 1 Obraz SE morfologii powierzchni prekursora hydrotalkitowego CuMnAl (1:2:1) z widocznymi płytkami fazy hydrotalkitowej oraz drobnoziarnistą fazą rodochrozytu.

## 1.4. Nowe perokso-związki Mo(VI), W(VI) i V(V) - synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne

(prof. Wiesław Łasocha, dr Dariusz Mucha, mgr Anna Dobija, mgr Marta Grzesiak)

W wyniku badań przeprowadzonych w ostatnim okresie czasu otrzymaliśmy kilka nowych nadtleno- związków molibdenu i wolframu. Bardzo obiecującym (z uwagi na wydajność, szybkość i łatwość syntezy) jest tetragonalny, żółty kompleks peroksomolibdenianowy kwasu nikotynowego. Związek ten uzyskiwany jest przez rozpuszczenie  $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  w nadtlenku wodoru, następnie do zakwaszonego roztworu dodawany jest kwas nikotynowy. Dodatkowym, istotnym osiągnięciem było dopracowanie, pod kątem wydajności i czystości związku, warunków syntezy diperoksomolibdenianów N-tlenku kwasu nikotynowego. Wynik ten umożliwi w przyszłości, wykonanie szeregu badań własności fizycznych tego związku (XRD vs. temp, badania katalityczne, etc.).

Obok badań związków perokso udało się nam uzyskać kilka nowych polimolibdenianów, w tym  $\gamma$ -oktamolibdenian 3,4-dimetylopirydyny, oraz badaliśmy procesy rozkładu wybranych  $\gamma$ -oktamolibdenianów. Uzyskaliśmy też nowy kompleks tlenku molibdenu z 1,2-fenylendiaminą. Cechą charakterystyczną tego połączenia, jest jego łańcuchowa budowa, oraz połączenie każdej molekuly diaminy z atomami molibdenu przez dwa atomy azotu (Rys. 1). Związek ten powstaje w wyniku długotrwałego ogrzewania roztworów kwasu molibdenowego z nadmiarem 1,2-fenylendiaminy. Wynik ten sugeruje, iż dla otrzymania soli kationowej syntezę należy prowadzić przy niskim pH. Dla uzyskania oktamolibdenianów typu gamma (z atomami azotu połączonymi z 2 atomami Mo w anionie  $\text{Mo}_8\text{O}_{26}$ ), należy unikać nadmiaru aminy i stosować krótkie czasy reakcji.



Rys. 1. Łańcuch molibdenowo tlenowy podstawiony 1,2-fenylendiaminą (a), rzut struktury (b) w kierunku [010]

Wzór sumaryczny –  $\text{C}_6\text{H}_8\text{MoN}_2\text{O}_3$ , FW - 252.0811 g/mol, T - 293(2) K

SG - Pnma, a,b,c [Å] 19.429, 10.109, 3.833, 90.0, 90.0, 90.0, V [Å<sup>3</sup>] 752.831, Z=4.

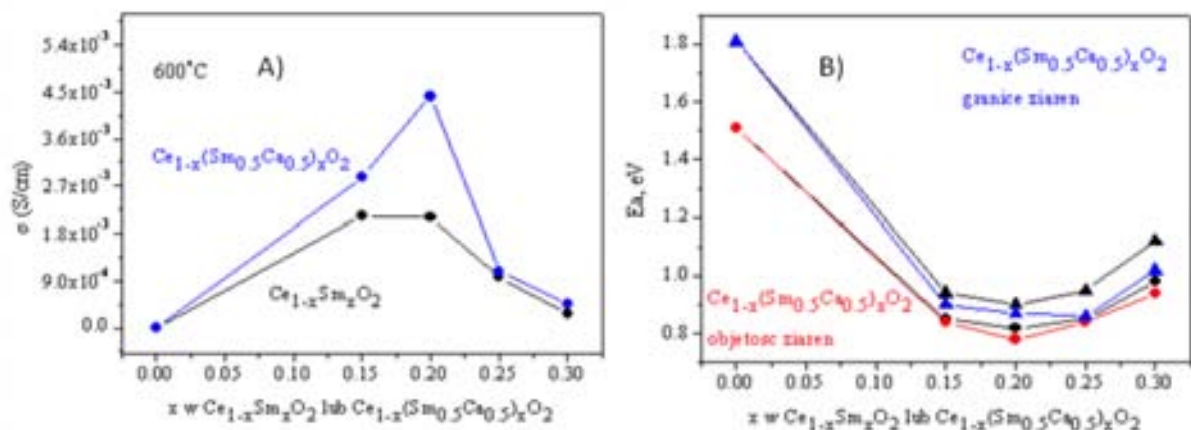
Dodatkowo prowadzono badania z zakresu inżynierii krystalicznej, w tym syntezy i badania strukturalne, nowych polimerów koordynacyjnych oraz kompleksów halogenkowych związków kadmu i amin aromatycznych.

## 1.5. Określenie właściwości elektrycznych i elektrochemicznych roztworów stałych w układach $\text{CeO}_2\text{-M}_2\text{O}_3\text{-CaO}$ , oraz $\text{CeO}_2\text{-M}_2\text{O}_3\text{-Nd}_2\text{O}_3$ , gdzie $M = \text{Sm, Gd}$ , pod kątem ich zastosowania w ogniwach paliwowych

(dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN, dr Michał Mosialek, dr inż. Grzegorz Mordarski, dr Magdalena Dudek [AGH])

W pracy zbadano możliwości poprawy przewodności jonowej roztworów stałych  $\text{Ce}_{0.8}\text{M}_{0.2}\text{O}_2$ ,  $M = \text{Sm, Gd}$  poprzez stopniową zamianę kationów  $\text{Sm}^{3+}$  lub  $\text{Gd}^{3+}$  kationem o większym promieniu jonowym,  $\text{Nd}^{3+}$ , w wyniku czego powstaje tlenek o składzie określonym wzorem  $\text{Ce}_{0.8}\text{M}_{0.2-x}\text{Nd}_x\text{O}_2$ ,  $M = \text{Sm, Gd}$ . Z jednofazowych roztworów stałych w postaci proszków o składzie  $\text{Ce}_{0.8}\text{M}_{0.2-x}\text{Nd}_x\text{O}_2$ ,  $M = \text{Sm, Gd}$  otrzymanych metodą Pechiniego przygotowano serię próbek, które spiekano w temperaturze  $1500^\circ\text{C}$  przez 2 godziny. Metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej wyznaczono przewodność jonową tych elektrolitów w temperaturach od  $200$  do  $800^\circ\text{C}$ . W wyniku przeprowadzonych badań stwierdzono, że częściowe podstawienie kationów  $\text{Sm}^{3+}$  kationami  $\text{Nd}^{3+}$  w roztworze stałym o składzie  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2-x}\text{Nd}_x\text{O}_2$  prowadzi do wzrostu przewodności jonowej w porównaniu do elektrolitów  $\text{Ce}_{0.8}\text{M}_{0.2}\text{O}_2$ ,  $M = \text{Sm}$  lub  $\text{Gd}$ . Tak więc roztwory stałe  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.1}\text{Nd}_{0.1}\text{O}_2$  bardziej nadają się do zastosowania w średnitemperaturowych stało-tlenkowych ogniwach paliwowych IT-SOFC niż  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_2$ .

W pracy zbadano również efekt wprowadzenia kationów dwuwartościowych  $\text{Ca}^{2+}$  do struktury roztworu stałego  $\text{Ce}_{1-x}\text{Sm}_x\text{O}_2$ . Z jednofazowych roztworów stałych w postaci proszków o składzie  $\text{Ce}_{1-x}(\text{Sm}_{0.5}\text{Ca}_{0.5})_x\text{O}_2$ ,  $\text{Ce}_{1-x}\text{Sm}_x\text{O}_2$   $x=0,0, 0,15, 0,20, 0,25, 0,30$  przygotowano serię próbek, które spiekano w temperaturze  $1500^\circ\text{C}$  przez 2 godziny. Metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej wyznaczono przewodności jonowe tak otrzymanych elektrolitów w temperaturach od  $300$  do  $800^\circ\text{C}$ . Wprowadzenie do struktury  $\text{CeO}_2$  równych ilości kationów wapnia i samaru prowadzi do otrzymania związku o wyższej przewodności jonowej niż w przypadku analogicznego związku domieszkowanego wyłącznie samarem. Na rysunku przedstawiono wyznaczone przewodności całkowite (obliczone jako suma przewodności objętościowej i po granicach ziaren) a także energie aktywacji przewodności jonowej badanych roztworów stałych



## 1.6. Właściwości elektrokatalityczne nanostrukturalnych tlenków i kompozytów węglowo-tlenkowych otrzymanych drogą syntezy z materiałów o strukturze hydrotalkitu

*(dr hab. Paweł Nowak prof. I KiFP PAN, dr inż. Aleksandra Pacuła)*

Przedmiotem pracy była synteza kompozytów tlenkowo-węglowych i tlenkowych oraz charakterystyka ich właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych. Do otrzymania kompozytów tlenkowo-węglowych wykorzystano materiał o strukturze typu hydrotalkitu zawierający w swoim składzie takie pierwiastki metaliczne jak Ni, Co i Al (Ni:Co:Al = 1:1:1). Synteza kompozytów tlenkowo-węglowych polegała na ogrzewaniu materiału typu hydrotalkitu w temperaturze 800°C lub 900°C w przepływie Ar nasyconego parami CH<sub>3</sub>CN. W trakcie syntezy następował termiczny rozkład obu substratów prowadzący do wydzielenia tlenków, których część ulegała redukcji do form metalicznych (katalizujących następnie powstawanie nanostruktur węglowych) oraz do wytworzenia depozytu węglowego. Kompozyty tlenkowe otrzymano z kompozytów tlenkowo-węglowych w wyniku ich ogrzewania w wysokiej temperaturze w powietrzu (800°C lub 900°C), co pozwoliło na usunięcie składnika węglowego i przekształcenie form metalicznych w tlenkowe. Otrzymane materiały proszkowe scharakteryzowano za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej, analizy termicznej, sorpcji azotu, spektroskopii fotoelektronów oraz skaningowej i transmisyjnej mikroskopii elektronowej. Aktywność elektrokatalityczną w reakcji redukcji tlenu badano w fazie ciekłej w środowisku alkalicznym (0.1 M NaOH) z zastosowaniem woltamperometrii cyklicznej (CV) stosując, jako elektrodę pracującą, elektrodę z węgla szklanego pokrytą badanym kompozytem, a jako elektrodę odniesienia nasyconą elektrodę kalomelową.

Głównym komponentem (70%) kompozytów tlenkowo-węglowych był składnik węglowy, który przede wszystkim stanowiły wielościennie nanorurki węglowe o średnicy w zakresie 20-150 nm. Mniejszą część (30%) składu kompozytów stanowiły krystaliczne cząstki metali (Ni, Co) oraz amorficzny Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Kompozyty tlenkowo-węglowe były makroporowate, ich powierzchnia właściwa wynosiła 90 m<sup>2</sup>/g i 44 m<sup>2</sup>/g, odpowiednio dla materiału otrzymanego w 800°C i 900°C. Oba kompozyty tlenkowo-węglowe wykazywały podobną aktywność w reakcji redukcji tlenu do wody zachodzącej z wymianą 4 elektronów. Potencjał, przy którym na krzywej CV zarejestrowano maksimum piku redukcji tlenu wynosił -0.28 V i -0.30 V, odpowiednio dla kompozytu otrzymanego w 800°C i 900°C. Kompozyty tlenkowe stanowiły mieszaninę krystalicznych faz tlenkowych (NiO, Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, NiAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, CoAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) i amorficznego Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. W porównaniu do kompozytów zawierających składnik węglowy wykazywały dużo słabszą aktywność elektrokatalityczną w reakcji redukcji tlenu, prawdopodobnie między innymi ze względu na mniejsze przewodnictwo elektryczne. W przypadku kompozytu tlenkowego otrzymanego w 800°C i 900°C, maksimum piku redukcji tlenu na krzywej CV zarejestrowano przy potencjale -0.43 V i -0.46 V, odpowiednio.

## **2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju**



## 2.1. Zredukowane sole miedziowe i palladowe heteropolikwasów jako katalizatory bifunkcyjne

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

Celem badań było otrzymanie soli miedziowej i palladowej heteropolikwasu typu Dawsona  $H_6P_2W_{18}O_{62}$  oraz wykazanie ich bifunkcyjnych właściwości katalitycznych (kwasowych i redoksowych).

Sól miedziową  $Cu_3P_2W_{18}O_{62}$  (CuD) otrzymano w wyniku dodawania stechiometrycznej ilości octanu miedzi (II) do rozpuszczonego w niewielkiej ilości wody  $H_6P_2W_{18}O_{62}$ . Otrzymany jasnoniebieski roztwór odparowano i suszono w suszarce w temp  $50^{\circ}C$ , a następnie przechowywano w temperaturze pokojowej nad nasyconym roztworem  $Mg(NO_3)_2$ . Analiza termiczna wykazała zawartość 26 cząsteczek  $H_2O$  w jednym molu soli. Sól palladową  $Pd_3P_2W_{18}O_{62}$  (PdD), o barwie brunatnej, otrzymano stosując chlorek palladu (II). Po syntezie preparat suszono  $50^{\circ}C$  w suszarce próżniowej i przechowywano w eksykatorze w bezwodnej atmosferze.

W celu określenia właściwości katalitycznych soli miedziowej i palladowej zastosowano reakcję konwersji etanolu w fazie gazowej. Za miarę aktywności centrów kwasowych badanych katalizatorów przyjmowano stężenie produktów; etylenu (C2) i eteru dietylowego (DEE), z kolei na centrach redoksowych powstawał aldehyd octowy (AcAl). Do badań użyto równomolowe ilości obu soli. Każdy test katalityczny składał się z dwóch etapów:

- I etap: redukcji soli miedziowej lub palladowej etanolem ( $210-290^{\circ}C$ ), 150 min.
- II etap: właściwa reakcja konwersji alkoholu ( $230-290^{\circ}C$ ) bez powietrza lub z jego udziałem.

Obie sole wykazały najwyższą aktywność w pierwszych minutach redukcji etanolem. Podczas trwania I etapu testu obserwowano najpierw spadek ich aktywności, a następnie jej stabilizację. Tabela przedstawia wyniki testów katalitycznych dla obu soli w zależności od zastosowanej temperatury ich redukcji. Konwersja alkoholu na soli palladowej była 3-4 razy wyższa niż dla soli miedziowej. Niezależnie od preparatu wraz ze wzrostem temperatury redukcji spada selektywność do DEE na korzyść wzrostu selektywności do C2. Natomiast selektywność do AcAl nie przekraczała 1,5%. Podobne tendencje zmian selektywności do danych produktów obserwowano podczas etapu II bez dostępu powietrza na obu solach zredukowanych w  $250^{\circ}C$ .

Tabela. Wyniki testów katalitycznych

Próbka	Temperatura redukcji [ $^{\circ}C$ ]	Konwersja etanolu [%]	Selektywność, %		
			DEE	C2	AcAl
CuD	210	13,0	48,7	51,3	0
	230	15,9	36,1	62,4	1,5
	250	16,0	20,7	79,3	0
	270	18,3	14,1	85,1	0,8
	290	14,8	9,2	89,6	1,2
PdD	210	42,4	32	67,4	0,6
	230	26,4	28,6	70,7	0,7
	250	49,7	15,9	83,2	0,9
	270	45,5	13,1	85,7	1,1
	290	53,8	6,5	92,4	1,1

Wprowadzenie powietrza w trakcie II etapu testu katalitycznego soli CuD, zredukowanej w  $250^{\circ}C$ , spowodowało znaczny wzrost selektywności do AcAl (do 76% w  $250^{\circ}C$ ) i wzrost konwersji etanolu. Konwersja alkoholu rosła wraz z temperaturą. AcAl stał się głównym produktem. Katalizator wykazywał więc wyraźną aktywność bifunkcyjną. W przypadku soli PdD zarejestrowano obecność estru octanu etylu – produktu powstałego na centrach zarówno kwasowych jak i redoksowych.



## 2.2. Badanie transestryfikacji triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów na osnowie związków cynku

(*dr hab. Alicja Drelinkiewicz prof. IKiFP PAN, mgr Adam Zięba [doktorant MSD]*)

Reakcja transestryfikacji triglicerydów metanolem prowadząca do otrzymania estrów metylowych (tzw. bioestrów) badana była w obecności szeregu katalizatorów bazujących na soli  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$ . Podjęcie badań nad użyciem tego katalizatora podyktowane było faktem, że związki cynku, m.in. mieszane tlenki  $Al_2O_3$  i  $ZnO$  charakteryzują się dobrą aktywnością w tej reakcji i stosowane są w przemyśle. Ulegają one jednak powolnej deaktywacji spowodowanej stopniowym rozpuszczaniem się katalizatora w metanolu. Ponadto, w reakcji transestryfikacji wysoką aktywnością charakteryzują się hydrotalkity Mg-Al. Stosowane w obecnych badaniach sole  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$  charakteryzują się, podobnie jak hydrotalkity Mg-Al strukturą warstwową. Właściwości fizykochemiczne badanych katalizatorów badano wieloma metodami (BET, SEM, FT-IR, XRD) dla preparatów przed jak i po reakcji metanolizy triglicerydów (triacetin, modelowy trigliceryd i olej rycynowy - roślinny trigliceryd). Pierwsza część badań obejmowała określenie wpływu temperatury wygrzewania ( $60-300^{\circ}C$ ) soli  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$  na jej aktywność w reakcji metanolizy. Stwierdzono, że wraz ze wzrostem temperatury prażenia, sole ulegały stopniowemu rozkładowi, który zachodził z utworzeniem licznych produktów pośrednich, a końcowym produktem był  $ZnO$ . Towarzyszył temu spadek powierzchni właściwej, porowatości i zasadowości a w konsekwencji spadek aktywności katalitycznej w reakcji metanolizy obu triglicerydów, triacetinu i oleju rycynowego. W systematycznych badaniach stosowano katalizatory wygrzewane w temp.  $60^{\circ}C$ .

Stwierdzono, że w trakcie reakcji metanolizy di- i mono-glicerydy ulegały stosunkowo silnej adsorpcji na centrach aktywnych obecnych w  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$ , co powodowało spadek szybkości reakcji. W celu wyeliminowania tego efektu, reakcje metanolizy prowadzono etapowo, co pozwoliło uzyskać wysokie wydajności do bio-estrów. Katalizatory  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$  ulegały tylko częściowej i odwracalnej deaktywacji w trakcie reakcji. Po regeneracji (mycie THF) wykazywały stabilną aktywność w kolejnych cyklach procesu transestryfikacji triglicerydów metanolem.

Aktywność soli  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$  zależała ponadto od stosunku molowego metanol: trigliceryd, sposobu traktowania katalizatora przed reakcją (kontaktowanie z metanolem lub triglicerydem), jak i od obecności tzw. co-solwentów (THF, n-heksan, itd). W oparciu o analizę zmiany stężenia di- i mono-glicerydów (GC, HPLC) stwierdzono, że działanie co-solwentów związane jest z wpływem na właściwości adsorpcyjne katalizatorów stałych w stosunku do poszczególnych glicerydów.

## 2.3. Katalizator tlenkowo-srebrowy do pełnego utleniania związków organicznych

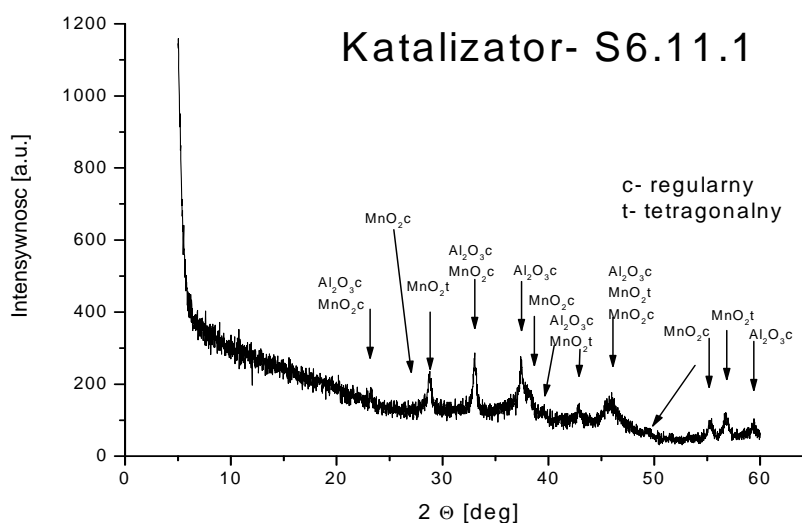
(dr Tadeusz Machej, mgr Wojciech Rojek, dr Łukasz Mokrzycki)

Lotne związki organiczne (LZO) mogą być niszczone na drodze termicznego lub katalicznego spalania. Związki takie spalają się w powietrzu tworząc  $\text{CO}_2$  i wodę w przypadku LZO zawierających tylko węgiel, wodór i tlen. W idealnym przypadku ciepło wytwarzane podczas utlenienia podtrzymuje proces spalania. Jednak rozcieńczony strumień odpadów wymaga zwykle dodatkowego paliwa.

Utlenianie kataliczne zachodzi w temperaturach znacznie niższych niż spalanie termiczne. Ten ostatni proces wymaga zwykle temperatur w zakresie  $750\text{--}900^\circ\text{C}$ , podczas gdy utlenianie kataliczne zachodzi w przedziale  $200\text{--}500^\circ\text{C}$ . Spalanie kataliczne jest więc samopodtrzymującym się procesem przy znacznie niższych stężeniach LZO niż w przypadku spalania termicznego. Stanowi ono ekonomiczniejsze rozwiązanie ze względu na niższe koszty eksploatacyjne. Koszty te mogą jeszcze zostać obniżone przez wprowadzenie katalizatorów działających w zakresie temperatur  $100\text{--}200^\circ\text{C}$ . Standardowe katalizatory nie są efektywne poniżej  $200^\circ\text{C}$ , ponieważ zachodzi na nich adsorpcja LZO lub produktów reakcji.

Celem badań było opracowanie katalizatora, który działałby efektywnie w temperaturze poniżej  $200^\circ\text{C}$ , tj. umożliwiał wysoką konwersję LZO i nie powodował adsorpcji substratów i/lub produktów reakcji.

Katalizator składa się z  $\text{Mn}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MnO}_2$  i jonów srebra rozproszonych na  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  (rysunek poniżej).



Aktywność katalizatora sprawdzano w reakcji pełnego utleniania metanolu i etanolu. Reakcje utleniania tych alkoholi prowadzono w reaktorze przepływowym przy wartości  $\text{GHSV}=10.000\text{ h}^{-1}$ . Stężenie reagentów wynosiło  $0,2\text{ g/m}^3$ . Konwersja alkoholi była monitorowana poprzez pomiar stężenia  $\text{CO}_2$  na wylocie z reaktora. Stwierdzono, że utlenianie metanolu jest efektywne poniżej  $200^\circ\text{C}$ . Konwersja metanolu i selektywność do  $\text{CO}_2$  osiągają 100 % w temp.  $175^\circ\text{C}$ , podczas gdy w przypadku etanolu wymaga to temp.  $200^\circ\text{C}$ .

Stabilność aktywności katalizatora sprawdzono w długotrwałym eksperymencie. Katalizator utrzymywano w temperaturze  $400^\circ\text{C}$  przez 500 godzin w przepływie powietrza zawierającego reagenty. Następnie katalizator schłodzono do temperatury poniżej  $200^\circ\text{C}$  i zmierzono jego aktywność w reakcji utleniania metanolu i etanolu. Konwersja alkoholi i selektywność do  $\text{CO}_2$  nie zmieniła się po długotrwałym eksperymencie.

## 2.4. Transformacja węglowodorów terpenowych na mikro- i mezoporowatych sitach molekularnych

(prof. Bogdan Sulikowski, dr Ewa Włoch, mgr inż. Urszula Filek, dr Łukasz Mokrzycki)

Terpeny obejmują szereg węglowodorów o urozmaiconej budowie.  $\alpha$ -Pinen jest jednym z ważnych przedstawicieli monoterpenów wykorzystywanym do syntezy półproduktów przemysłu chemicznego: kamfenu, limonenu i *p*-cymenu. Jego źródłem jest terpentyna siarczanowa. Przekształcenie  $\alpha$ -pinenu na drodze izomeryzacji jest procesem przemysłowym, prowadzonym w chwili obecnej na uwodnionym ditlenku tytanu o właściwościach kwasowych. Katalizator ten wykazuje jednakże szereg wad i dlatego podjęto badania mające na celu zastąpienie go innymi, bardziej wydajnymi kontaktami mikro- i mezoporowatymi o regularnej strukturze i zawierających centra kwasowe. Przeprowadzone uprzednio badania wykazały przydatność do tego procesu kilku zeolitów różniących się strukturą, składem chemicznym i architekturą porów. Uzyskanie wysokoaktywnego i selektywnego katalizatora wymaga jednakże zrozumienia procesów zachodzących w zeolitach na poziomie molekularnym podczas ich modyfikacji.

Jednym z najważniejszych zeolitów (sit molekularnych), produkowanych w dużych ilościach w skali przemysłowej, jest zeolit typu Y o strukturze fojazytu (FAU), zawierający system wielkich i małych komór. W wielkich komorach zeolitu Y można prowadzić szereg procesów katalitycznych. W celu syntezy katalizatora zeolit ten należy zmodyfikować, zmieniając w zamierzony sposób rodzaj i ilość kationów kompensujących ujemny ładunek sieci glinokrzemianowej, stosunek  $\text{SiO}_2$  do  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , a także generując wtórny system mezoporów, ułatwiających transport substratów i produktów reakcji zachodzących w jego wnętrzu.

Do syntezy katalizatorów zeolitowych użyto komercyjnego zeolitu typu Y. Zeolit ten modyfikowano dwiema metodami. Pierwsza z nich polegała na usunięciu ze struktury części krzemu w obecności roztworów wodorotlenku sodowego o dobranym stężeniu. Uzyskane materiały poddano badaniom fizykochemicznym, dokumentując ich strukturę przed i po modyfikacji (XRD, SEM), a także określając właściwości sorpcyjne metodą adsorpcji azotu. Otrzymane preparaty testowano w procesie izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu w fazie ciekłej.

Zastosowano również drugą metodę modyfikacji, czyli dealuminiowanie, polegającą na usunięciu z sieci glinokrzemianowej części glinu. Dealuminiowanie zeolitów można prowadzić stosując odpowiednie procedury wymiany jonowej, wygrzewania i traktowania ich kwasami organicznymi lub nieorganicznymi. Obecnie badano przebieg procesu dealuminiowania zeolitu Y z użyciem kwasu organicznego (etylenodiaminotetraoctowego). Wykonano badania fizykochemiczne otrzymanych preparatów i wstępne badania katalityczne w procesie izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu.

Ponadto, w ramach współpracy z zespołem z Cambridge (prof. J. Klinowski) kontynuowano badania dotyczące właściwości częściowo i całkowicie deuterowanych nadchloranów amonu.

Natomiast w ramach współpracy z zespołem ze Stuttgartu (prof. M. Hunger) kontynuowano badania heteropolikwasów i ich soli metodą magnetycznego rezonansu jądrowego z rotacją pod kątem magicznym. Badano zmiany struktury zachodzące w takich próbkach w wyniku zmian temperatury. Dla wybranych preparatów wykonano testy katalityczne utleniania norbornenu do epoksynorbornanu w fazie ciekłej.

## 2.5. Układy Ag-ZnO-(ZrO<sub>2</sub>) jako katalizatory do uwodornienia CO<sub>2</sub>

*(dr hab. Ryszard Grabowski prof. IKiFP PAN, mgr Michał Śliwa, dr Dariusz Mucha, dr Robert P. Socha, dr Małgorzata Ruggiero-Mikolajczyk, mgr Jan Mizera)*

Synteza metanolu jest od wielu lat przedmiotem szeroko zakrojonych badań. U ich podłoża leży zarówno potrzeba przeróbki tanich surowców, takich jak CO<sub>2</sub>, jak i walka z efektem cieplarnianym. Układy zawierające miedź i ZrO<sub>2</sub>, także w kombinacji z innymi tlenkami takimi jak ZnO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, są aktywne w reakcji uwodornienia CO<sub>2</sub> do metanolu. Katalizatory srebrne są mniej aktywne w syntezie metanolu i z tego też powodu były rzadziej badane. Struktura i mechanizm działania katalizatorów miedziowych były bardzo szeroko badane. W katalizatorach tego typu stwierdzono istnienie efektu synergetycznego pomiędzy miedzią a ZrO<sub>2</sub> lub ZnO; uważa się, że stabilizacja jonów Cu<sup>+1</sup> na powierzchni katalizatora odgrywa ważną rolę w tym zjawisku.

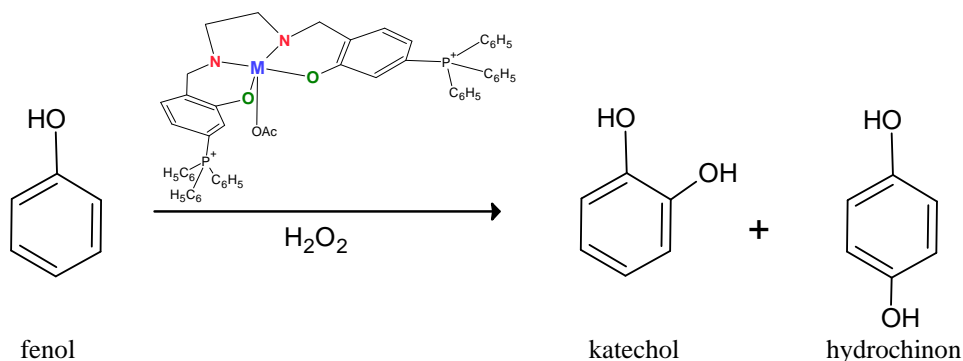
Celem tej pracy było: a) stwierdzenie czy efekt synergetyczny (podobny do tego opisanego dla katalizatorów miedziowych) istnieje również w przypadku katalizatorów Ag/ZrO<sub>2</sub> i Ag/ZrO<sub>2</sub>/ZnO oraz b) zaproponowanie mechanizmu tego zjawiska. Strukturalne modyfikacje w katalizatorach Ag/ZrO<sub>2</sub> i Ag/ZrO<sub>2</sub>/ZnO wprowadzono poprzez zmiany w składzie i metodyce preparatyki. Zmiany te były następnie korelowane z aktywnością i selektywnością tych katalizatorów w reakcji uwodornienia CO<sub>2</sub> do metanolu.

Katalizatory typu Ag/ZrO<sub>2</sub> i Ag/ZrO<sub>2</sub>/ZnO otrzymywane były metodą współstrącania, a ich struktura była badana przy użyciu metody XRD oraz TPR. Spektroskopia XPS oraz spektroskopia Augera były używane do określenia stanu elektronowego srebra. Stwierdzono, że odpowiednie warunki preparatyki katalizatorów wpływają na stopień dyspersji srebra i jego stan elektronowy oraz na zawartość faz polimorficznych ZrO<sub>2</sub> (faza tetragonalna lub monokliniczna). Obecność wakacji tlenowych stabilizuje zarówno nietrwałą fazę tetragonalną t-ZrO<sub>2</sub>, jak i kationy Ag<sup>+1</sup>, które są rozmieszczone w otoczeniu tych wakacji. Wydajność do metanolu wzrasta wraz z zawartością t-ZrO<sub>2</sub>, natomiast reakcja odwrotna (RWGS) jest przyspieszana przez zdyspergowane srebro metaliczne.

## 2.6. Kationowe makrocykliczne metalokompleksy jako katalizatory utleniania fenolu

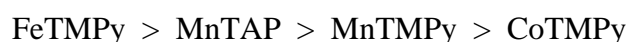
(dr Jan Poltowicz, dr Katarzyna Pamin, mgr Robert Karcz)

Przemysł chemiczny, petrochemiczny i farmaceutyczny produkują duże ilości zanieczyszczeń, a wśród nich szczególnie niebezpieczne są fenol i jego związki. Już przy niskich stężeniach wykazują one wysoką toksyczność. Biomimetyczne utlenianie zanieczyszczeń środowiska przy zastosowaniu ekologicznego utleniacza  $H_2O_2$  jest jedną z metod degradacji fenolu i jego pochodnych.

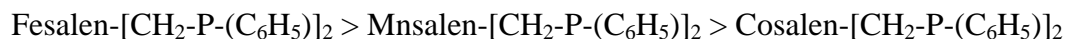


Rysunek 1. Schemat badanej reakcji

Celem pracy była synteza rozpuszczalnych w wodzie kationowych metalokompleksów makrocyklicznych i ich zastosowanie jako katalizatorów utleniania fenolu wodą utlenioną. Jako katalizatory użyto metalokompleksy porfiryne: MnTMPy, FeTMPy, CoTMPy, MnTAP oraz metalokompleksy salenowe: Mnsalen- $[CH_2-P-(C_6H_5)_2]$ , Fesalen- $[CH_2-P-(C_6H_5)_2]$ , Cosalen- $[CH_2-P-(C_6H_5)_2]$ . Głównymi produktami reakcji są katechol i hydrochinon. Wszystkie badane katalizatory były aktywne w badanym procesie. Rodzaj metalu i właściwości podstawników mają wpływ na konwersję substratu oraz wydajność produktów reakcji. Wśród metalokompleksów porfirynych najwyższą aktywność wykazywał żelazowy kompleks FeTMPy i on też był najbardziej aktywny spośród wszystkich stosowanych kompleksów. Dla metaloporfiryn otrzymano następujący szereg aktywności:



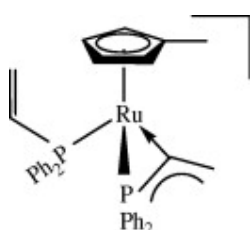
Najbardziej aktywny wśród kompleksów salenowych był kompleks żelaza Fesalen- $[CH_2-P-(C_6H_5)_2]$ . Dla tej grupy związków otrzymano podobny szereg aktywności:



Stwierdzono, że struktura ligandu ma wpływ na własności katalityczne katalizatorów. Kationowe metaloporfiryne z ładunkiem na atomie azotu są bardziej aktywne niż kationowe metalosaleny z ładunkiem na atomie fosforu. Wszystkie kationowe metaloporfiryne rozpuszczalne w wodzie są bardziej aktywne od metalokompleksów salenowych. Najwyższą selektywność do katecholu wykazał kompleks MnTMPyP a do hydrochinonu kompleks CoTMPyP. Na bazie otrzymanych rezultatów zaproponowano mechanizm reakcji utleniania fenolu wodą utlenioną.

## 2.7. Katalizatory rutenowe do procesów selektywnego uwodornienia

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Dorota Duraczyńska,  
dr hab. Alicja Drelinkiewicz prof. IKiFP PAN, dr Małgorzata Zimowska, dr Robert Socha)



Kationowy kompleks Ru(II)  $[(\eta^5\text{-MeC}_5\text{H}_4)\text{Ru}(\eta^3\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)(\eta^1\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)]^+$ , wykazujący aktywność katalityczną w reakcjach uwodornienia uwarunkowaną obecnością hemilabilnego ligandu fosfinowego, osadzano na aluminowanych mezoporowatych sitach molekularnych typu FSM-16 i SBA-15. Cechą charakterystyczną wybranych nośników jest obecność jednorodnych porów o średnicy w zakresie 2-10 nm. Do naniesienia kompleksu wykorzystano metodę wymiany jonowej. Metoda ta nie wymaga modyfikacji powierzchni nośnika lub ligandów w związkach kompleksowych oraz pozwala na przeprowadzenie procesu immobilizacji w niskich temperaturach i przy obojętnym pH, co ma decydujący wpływ na stabilność związków metaloorganicznych. Otrzymane katalizatory heterogeniczne zostały scharakteryzowane metodami XRD, XPS, UV-Vis, NMR ( $^{27}\text{Al}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{31}\text{P}$ ), FTIR, TG/DTG/DSC oraz analizy izoterm adsorpcji azotu. Na podstawie analizy wyników badań fizykochemicznych stwierdzono, że w przypadku nośników aluminowanych bezpośrednio, tj. na etapie powstawania żelu syntezowego, kation metaloorganiczny zajmuje preferencyjnie miejsce wewnątrz kanałów mezoporowatej matrycy, natomiast w przypadku nośników aluminowanych posyntezywowo, tj. poprzez impregnację związkiem Al czystokrzemionkowej formy sita molekularnego, znaczna część kompleksu rutenu zlokalizowana jest na morfologicznej powierzchni katalizatora. Świadczy o tym m.in. analiza badań sorpcji azotu, wskazująca na znacznie większą redukcję średnicy i objętości porów po osadzeniu kompleksu Ru na nośnikach dotowanych glinem bezpośrednio. Efekt ten jest konsekwencją faktu, że, jak wykazały nasze wcześniejsze badania, dystrybucja centrów Al, których ładunek kompensowany jest przez kationowe kompleksy Ru, zależy od zastosowanej metody aluminowania.

W testowej reakcji uwodornienia fenyloacetyleny do styrenu i etylobenzenu katalizatory na nośnikach aluminowanych bezpośrednio, wykazywały wyraźnie wyższą aktywność niż układy zawierające podobną ilość kompleksu osadzonego na nośnikach dotowanych glinem posyntezywowo (Tabela). W tym ostatnim przypadku, nawet zastosowanie sita SBA-15 o bardzo dużych porach, ułatwiającego procesy dyfuzyjne, nie prowadziło do zwiększenia aktywności katalitycznej. Badania  $^{31}\text{P}$  MAS NMR wykazały, że w mało aktywnych katalizatorach wyraźnemu zmniejszeniu ulega pik związany z hemilabilnym ligandem fosfinowym, co sugeruje jego zaangażowanie w wiązanie kompleksu z powierzchnią nośnika i utworzenie formy zaadsorbowanej niezdolnej do oddziaływania z reagentami reakcji. Korzystny wpływ lokalizacji kompleksu Ru wewnątrz kanałów nośnika przypisano ograniczeniom sterycznym uniemożliwiającym utworzenie nieaktywnej struktury i wymuszającym alternatywny sposób związania kompleksu z powierzchnią.

Tabela. Wyniki testów katalitycznych

Katalizator	Szybkość uwodornienia fenyloacetyleny [ $\text{mol}_{\text{Phac}} \times \text{min}^{-1} \times \text{g}_{\text{com}}^{-1} \times 10^{-5}$ ]
5.2 wt% Ru(II)/FSM-16(Si/Al=40)(d)*	15.9
4.6 wt% Ru(II)/FSM-16(Si/Al=40)(p)	4.1
4.6 wt% Ru(II)/FSM-16(Si/Al=20)(d)	20.3
5.6 wt% Ru(II)/FSM-16(Si/Al=20)(p)	7.1
4.1 wt% Ru(II)/SBA-15(Si/Al=10)(d)	4.8

\*(d) – aluminowanie bezpośrednie, (p) – aluminowanie posyntezywowo



### **3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy**

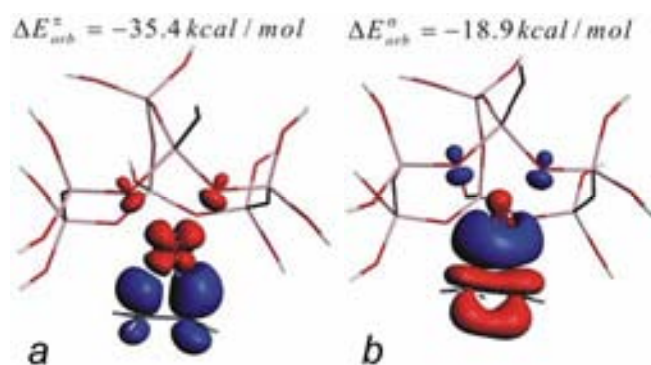




### 3.1. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych: badania kwantowo-chemiczne

(prof. Ewa Broclawik, dr Paweł Rejmak)

Modelowanie molekularne dla etenu i etynu oddziałujących z centrami Cu(I) i Ag(I) w zeolicie MFI zostało przeprowadzone metodą QMPot, gdzie struktura elektronowa pochodziła z obliczeń DFT (B3LYP oraz PBE, baza funkcyjna TZVP), natomiast sieć przestrzenna zeolitu była opisana przez pole siłowe MM. Analiza ETS-NOCV (Naturalne Orbitale Wartościowości Chemicznej) daje rozkład całkowitej różnicowej gęstości elektronowej na niezależne kanały przepływu ładunku pomiędzy oddziałującymi fragmentami, o ściśle określonej symetrii i kierunku. To pozwoliło jednoznacznie rozłożyć przepływ ładunku towarzyszący procesowi adsorpcji na procesy donacji oraz donacji zwrotnej. Przykładowe kanały donacji zwrotnej i donacji dla etenu oddziałującego z Cu(I)-ZSM-5 pokazuje Rysunek 1.



Rys. 1. Kontury dominujących kanałów przepływu elektronów dla etenu na Cu(I)ZSM-5:  $\pi^*$ -donacja zwrotna (a) oraz  $\sigma$ -donacja (b). Niebieski - zysk, czerwony – ubytek elektronów.

Miara energetyczna dla danego kanału ( $\Delta E_{orb}^i$ ) określa znaczenie  $\pi^*$ -donacji zwrotnej (z kationu na cząsteczkę) oraz  $\sigma$ -donacji dla adsorpcji oraz aktywacji cząsteczki. Tabela 1 pokazuje relację  $\Delta E_{orb}^i$  oraz zmierzonych przesunięć częstości drgań, zmian długości i rzędów wiązań C=C. Analiza przedstawionych wyników (podobnie dla etynu) wskazuje na istotne znaczenie  $\pi^*$ -donacji zwrotnej, która jest czynnikiem różnicującym dwa centra kationowe.

Tabela 1. Przesunięcia częstości (IR) dla etenu na centrach Cu(I) i Ag(I), zmiana rzędów i długości wiązań C=C, miary energetyczne kanałów przepływu elektronów

	$\Delta v_{exp}^*$ [cm <sup>-1</sup> ]	$\Delta R_{CC}$ [Å]	$\Delta b.o.$	$\Delta E_{orb}$ [kcal·mol <sup>-1</sup> ] $\sigma$ -donacja	$\Delta E_{orb}$ [kcal·mol <sup>-1</sup> ] $\pi^*$ -donacja zwrotna
Cu	-85	0.048	-0.43	-18.9	-35.4
Ag	-41	0.037	-0.30	-15.5	-18.9

\* przesunięcia częstości odnoszą się do etenu w fazie gazowej - 1623 cm<sup>-1</sup>

Komplementarna analiza kanałów przepływu gęstości elektronowej pomiędzy siecią zeolitu i kationem pokazuje, że sieć, jako rezerwuar elektronów, lepiej wspomaga proces donacji zwrotnej dla centrów miedziowych niż dla srebrowych. To wyraźnie sugeruje, że zdolność aktywacyjna centrum kationowego jest określana nie tylko przez wewnętrzne właściwości donorowe kationu metalu przejściowego, ale zależy także w znacznym stopniu od jego oddziaływań z tlenami sieciowymi, które dostarczają elektrony.

### 3.2. Modelowanie molekularne mechanizmów reakcji enzymatycznych

*(dr hab. Tomasz Borowski, prof IKiFP PAN)*

Jeden z podjętych problemów badawczych dotyczył struktury chemicznej produktu pośredniego zaobserwowanego przez Lipscomba i współpracowników dla reprezentatywnej dioksygenazy ekstradiolowej. Przy pomocy rentgenografii strukturalnej oraz wykorzystując mniej reaktywne substraty autorzy ci zdołali "uchwycić" gem-diolowy produkt pośredni, który, zgodnie z naszymi wcześniejszymi pracami, ma być metastabilnym produktem rozcięcia wiązania O-O. Ponieważ fakt zaobserwowania tego indywiduum w strukturze krystalicznej sugeruje jego znaczną stabilność, a poprzednie obliczenia wykazały, że w swojej podstawowej, tj. rodnikowej formie, ten produkt pośredni powinien być wysoce niestabilny, wykonaliśmy dodatkowe obliczenia mające na celu wyjaśnienie tej rozbieżności. Obliczenia dla kilku możliwych form redoks tego gem-diolowego produktu pośredniego pokazały, że w formie zredukowanej (powstałej po przyłączeniu H<sup>•</sup>) jest on formą stabilną o znacznej barierze aktywacji dla przemiany w epoksyd. Wyniki te pozwoliły na wyjaśnienie pozornej rozbieżności między doświadczeniem a teorią.

Kolejne zagadnienie dotyczyło mechanizmu reakcji z tlenem syntetycznego układu modelowego dla dioksygenaz intradiolowych. Wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych sugerują, że badana reakcja przebiega na sekstetowej i kwartetowej powierzchni energii potencjalnej, przy czym krytyczne etapy reakcji, obejmujące rozcięcie wiązania O-O oraz wstawienie tlenu do pierścienia, mają miejsce w stanie kwartetowym. Dodatkowo, udało się odtworzyć obserwowaną doświadczalnie specyficzność reakcji (rozcięcie intradiolowe) oraz zidentyfikować czynniki ją determinujące.

Ostatni z przebadanych problemów dotyczył mechanizmu selektywnego chlorowania łańcucha bocznego treoniny, reakcji katalizowanej przez zależną od Fe(II) i 2-oksoglutaranu halogenazy SyrB2. Przeprowadzone badania teoretyczne, obejmujące dokowanie molekularne dla substratu organicznego, obliczenia DFT i CASPT2 dla struktury elektronowej reaktywnego kompleksu oksoferrylowego oraz obliczenia DFT parametrów widma Mossbauera oraz mechanizmu reakcji pozwoliły na zaproponowanie struktur dla obserwowanych doświadczalnie dwóch form kluczowego produktu pośredniego oraz przedstawienia spójnej hipotezy wyjaśniającej selektywne chlorowanie treoniny przy preferencyjnym hydroksylowaniu innych (niefizjologicznych) substratów.

### 3.3. Struktura elektronowa modelowych układów heteropolikwasów - badania metodami klasterowymi i periodycznymi

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

Badania właściwości centrów aktywnych w układach heteropolikwasów wykonane zostały w oparciu o teorię DFT przy użyciu lokalnego modelu klasterowego (program Turbomol) i nielokalnego modelu periodycznego (program VASP). Obliczenia zrobiono dla dwóch grup związków: zmodyfikowanych jonów heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych (HPMo i HPW) oraz dla uwodnionych soli heteropolikwasu wolframowego.

Wykonując obliczenia dla zmodyfikowanych jonów HPMo i HPW sprawdzono wpływ charakteru jonu centralnego na właściwości centrów aktywnych. W tym celu przebadano związki  $\text{XMo}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$  i  $\text{XW}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$ , gdzie  $\text{X} = \text{P, Si, Fe}$ . Wyznaczone widma gęstości stanów pokazały, że we wszystkich układach pasmo walencyjne w pobliżu poziomu Fermiego zdominowane jest przez orbitale tlenów mostkowych (Ob, Oc) łączących metale addenda (Mo/W), podczas gdy część środkowa pasma charakteryzowana jest przez orbitale tlenów pojedynczo skoordynowanych do metalu (Od). Pasmo przewodnictwa opisane jest przez metale addenda (Mo/W). Charakter jonu centralnego wpływa na poziomy energetyczny orbitali granicznych oraz na wielkość przerwy wzbronionej (dla P i Si ok. 2 eV, dla Fe ok. 0.5 eV). Tabela przedstawia ładunki dla różnych heteropolikwasów molibdenowych. Widać, że właściwości tlenów mostkowych (Ob, Oc)

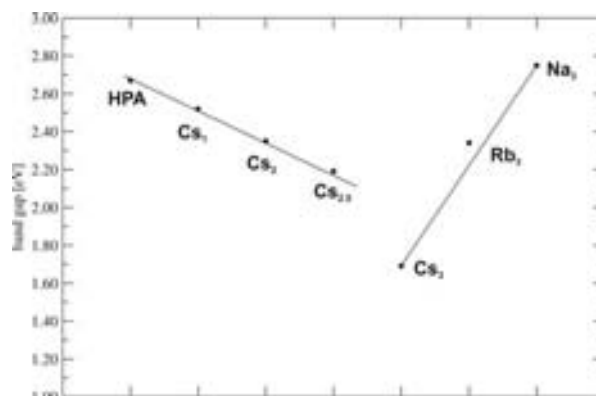
Tabela 1. Ładunki centrów aktywnych w  $\text{XMo}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$

	$\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$	$\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$	$\text{FeMo}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$
<b>Mo</b>	1,06	1,05	0,97
<b>P/Si/Fe</b>	0,88	1,18	1,37
<b>Oa</b>	-0,59	-0,72	-0,75
<b>Ob</b>	-0,44	-0,43	-0,44
<b>Oc</b>	-0,37	-0,38	-0,41
<b>Od</b>	-0,37	-0,40	-0,49

HPW wykonano dla szeregu związków, w których strukturalne cząsteczki wody zastępowano sukcesywnie przez atomy cezu:  $(\text{H}_5\text{O}_3)_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Cs}(\text{H}_5\text{O}_3)_2\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Cs}_2(\text{H}_5\text{O}_3)\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Cs}_{2.5}(\text{H}_5\text{O}_3)_{0.5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Cs}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ . Wyniki obliczeń wskazują na niewielkie różnice w strukturze geometrycznej związków oraz na umiarkowane zmiany w szerokości przerwy wzbronionej (Rys.1). Dane otrzymane dla soli  $\text{Cs}_{2.5}(\text{H}_5\text{O}_3)_{0.5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$  nie tłumaczą wyjątkowych właściwości katalitycznych tych soli, jakie obserwuje się doświadczalnie (najprawdopodobniej wynikają one z budowy makroskopowej ziaren soli otoczonych czystym heteropolikwasem). Porównanie wyników dla soli różnych metali alkalicznych  $\text{X}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ , gdzie  $\text{X} = \text{Na, Rb, Cs}$  wskazuje, że im mniejszy promień atomowy kationu tym większa wartość przerwy energetycznej (Rysunek 1).

w niewielkim stopniu zależą od jonu centralnego. Także zmiany nukleofilowości tlenów pojedynczo związanych z atomami addenda O(d) są nieznaczne. Największe modyfikacje obserwuje się dla tlenów skoordynowanych z jonem centralnym (Oa). W widmach IR dla różnych układów obserwuje się przesunięcia głównych pasm.

Periodyczne obliczenia dla soli



Rys. 1. Szerokość przerwy energetycznej wybranych soli HPW

### **3.4. Teoretyczne modelowanie wpływu oddziaływań elektrostatycznych oraz heterogeniczności energetycznej powierzchni sorbentów na kinetykę i równowagę procesu sorpcji jonów metali oraz protonów**

*(prof. Władysław Rudziński, dr Wojciech Plaziński)*

Adsorpcja jonów na granicy faz roztwór ciało stałe jest jednym z najczęstszych procesów występujących w przyrodzie; proces ten może być także używany do usuwania jonów metali ciężkich z roztworów wodnych. Pełne zrozumienie natury owego procesu, jego kinetyki i równowagi, może pozwolić na bardziej efektywne jego wykorzystanie.

Zbadano wpływ zmiennego w czasie pH na kinetykę adsorpcji jonów na granicy faz roztwór/ciało stałe posługując się statystyczną teorią transportu międzyfazowego (SRT). Warunek quasi-równowagowości narzucany przez SRT powoduje, że równania szybkości adsorpcji mają postać niezależną od przyjętego mechanizmu wiązania (adsorpcja konkurencyjna vs. wymiana jonowa). Te dwa mechanizmy mogą jednak być odróżnione na podstawie zależnego od czasu profilu pH roztworu. Opracowany model uwzględnia zarówno różne stosunki molowe proton/jon metalu, jak i możliwość wielocentrowego wiązania jonów. Wynikiem jest względnie prosty opis kinetyki adsorpcji jonów oraz towarzyszących jej zmian pH w roztworze; wyjaśniono również istotę zmiennego w czasie stosunku wymiany jon metalu/proton, obserwowalnego na drodze eksperymentalnej. Zaproponowany model może zostać wykorzystany jako punkt startowy do konstrukcji bardziej wyrafinowanych podejść, uwzględniających, np. efekt siły jonowej lub heterogeniczności energetycznej powierzchni.

Wyjaśniono także przyczynę stosowalności pewnej klasy modeli, odpowiadających modelowi Langmuira, z zależną od pH maksymalną pojemnością monowarstwy; są one stosowane do opisu zależnej od pH równowagi adsorpcyjnej w układach zawierających dwuwartościowe jony metali. Udowodniono, że modele te są przybliżeniem bardziej ogólnego podejścia, biorącego pod uwagę specjację jonów metalu w roztworze wodnym (efekt zależny od pH) oraz tworzenie wielocentrowych kompleksów powierzchniowych.

Ponadto, przeprowadzono badania wstępne skupiające się na oddziaływaniach pomiędzy łańcuchami poliguluronianów a jonami wapnia. Obejmowało to dopasowanie parametrów dla pola siłowego GROMOS96, odpowiadających za oddziaływania niewiążące obejmujące ujemnie naładowane jednostki uronianów oraz jony wapnia.

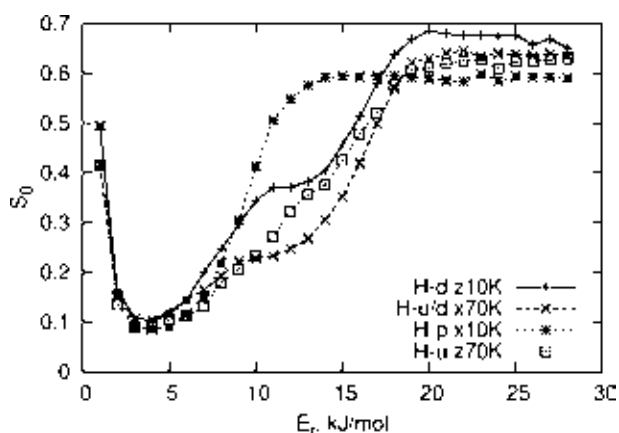
### 3.5. Badania wpływu energii translacyjnej, rotacyjnej oraz mechanizmu rozproszenia energii na współczynnik przyklejenia molekuł wody na powierzchni platyny prowadzone przy użyciu dynamiki molekularnej

(dr hab. Tomasz Pańczyk prof. IKiFP PAN)

Adsorpcja wody na powierzchniach metali pełni w dużej mierze rolę prototypu układu, w którym istotną rolę odgrywają wiązania wodorowe. Przeprowadzone pomiary współczynnika przyklejenia wody na powierzchni Pt{110}-(1x2), przy użyciu ponaddzwiękowych wiązek molekularnych, doprowadziły do rezultatów, których zrozumienie wymaga bliższych badań teoretycznych. Mimo braku przesłanek, co do istnienia barier aktywacji obserwuje się silny wzrost współczynnika przyklejenia wraz ze wzrostem energii translacyjnej jak również bardzo złożony wpływ energii rotacyjnej na wartość współczynnika przyklejenia.

Badania przeprowadzone metodą dynamiki molekularnej wykazały dominującą rolę mechanizmu dyssypacji energii translacyjnej w momencie uderzenia o powierzchnię na prawdopodobieństwo adsorpcji molekuly wody. Mechanizm ten został zidentyfikowany jako oparty na tworzeniu par elektron-dziura. Uwzględnienie go w obliczeniach pozwoliło na uzyskanie bardzo dobrej zgodności wyników symulacji i danych eksperymentalnych.

Rozszerzenie badań na zależność współczynnika przyklejenia od stopnia wzbudzenia rotacyjnego molekuł wody wykazało, że zastosowany model jest zbyt uproszczony, aby w sposób zadowalający wyjaśnić złożoną zależność prawdopodobieństwa adsorpcji od energii rotacyjnej. W dalszym kroku model obliczeniowy został poddany wielorakim modyfikacjom mającym na celu uwzględnienie wpływu kąta uderzenia cząsteczki wody na prawdopodobieństwo rozproszenia jej energii kinetycznej. Ostatecznie uzyskano zadowalającą korelację pomiędzy wynikami



Rys. 1. Współczynnik przyklejenia obliczony dla różnych orientacji i energii rotacyjnych cząsteczek wody

teoretycznymi i eksperymentalnymi w zakresie energii kinetycznych większych od 10 kJ/mol (Rysunek 1). Pozwoliło to na postawienie tezy, iż prawdopodobieństwo dyssypacji energii kinetycznej zależy również od współrzędnych kątowych molekuly wody. W zakresie energii kinetycznych mniejszych niż 10 kJ/mol konieczne było uwzględnienie dodatkowego czynnika, jakim może być istnienie znacznej dyspersji energii kinetycznej wiązki molekularnej generowanej w ponaddzwiękowej ekspansji. Pozwoliło to uzasadnienie pewnej rozbieżności wyników teoretycznych i eksperymentalnych obserwowanej dla niskich energii kinetycznych cząsteczek wody.

### 3.6. Badanie zależności między reaktywnością chemiczną a strukturą molekularną reagentów

(prof. Małgorzata Witko, dr Maciej Szaleniec, dr Dorota Rutkowska-Żbik)

Celem badań było określenie zależności pomiędzy strukturą molekularną reagentów, a ich reaktywnością chemiczną. Prowadzone badania obejmowały wpływ modyfikacji strukturalnych w pierścieniach aromatycznych i podstawników alkilowych na szybkość i stereoselektywność wybranych reakcji w dwóch grupach związków: dla węglowodorów alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych w biokatalitycznym utlenianiu podstawnika alkilowego katalizowanym przez dehydrogenazę etylobenzenową (EBDH) oraz dla pochodnych chlorofili w reakcji metalacji, czyli tworzenia kompleksów z jonami metali.

Badania przeprowadzono za pomocą metod doświadczalnych (spektroskopowe pomiary kinetyczne, chiralna chromatografia LC-MS) oraz teoretycznych (kwantowo-chemiczne obliczenia w ramach teorii funkcjonałów gęstości (DFT) - B3LYP, BP).

W celu określenia zależności między strukturą molekularną węglowodorów alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych a szybkością reakcji zgromadzono bazę danych aktywności w reakcji z EBDH dla 46 związków i przeprowadzono obliczenia DFT mające na celu pełną charakterystykę tych związków, jak i ich reaktywności. Poza standardowymi parametrami kwantowo-chemicznymi (ładunki cząstkowe, energie orbitalne, moment dipolowy, przesunięcia H i C w NMR etc.), obliczono również parametry termochemiczne ( $\Delta G$  reakcji aktywacji wiązania C-H do rodnika i do karbokationu) oraz potencjał elektrostatyczny w jądrze (jako parametr alternatywny dla eksperymentalnej stałej Hammeta). Tak uzyskane parametry wejściowe poddano selekcji za pomocą algorytmu automatycznego projektanta architektury sieci w programie Statistica, a następnie zbudowano model neuronowy wiążący eksperymentalnie zmierzoną aktywność, zarówno substratów jak i inhibitorów z parametrami teoretycznymi. Najlepszy uzyskany model MLP 12-7-1 wykazał się wysokimi zdolnościami predykcyjnymi ( $R^2=0.929$ ).

Kwestę wpływu modyfikacji molekularnych na stereoselektywność przebadano wykonując serię analiz chromatograficznych mieszanin reakcyjnych EBDH dla związków o różnych podstawnikach w pozycji para względem grupy etylowej. Wykazano 100% S-stereoselektywność dla podstawników p-H, p-CH<sub>3</sub>, p-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, p-F, p-OCH<sub>3</sub>, oraz odpowiednio 80% i 55% S-selektywność dla podstawników p-OH, p-NH<sub>2</sub> oraz ok. 5% S dla podstawnika p-Ph. Analiza wykazała wysoką korelację ( $R^2=0.87$ ) stabilizacji stanu rodnikowego ( $\Delta\Delta G^{\text{rodnik}}$ ) przez dany podstawnik z ilością pojawiającego się izomeru R. Również analiza zależności różnicy energii HOMO-LUMO i stereoselektywności wykazała liniową zależność dla 4-Ph, 4-NH<sub>2</sub>, 4-OH, 4-OCH<sub>3</sub> ( $R^2=0.98$ ), która ulega wysyceniu (100% izomeru S) po przekroczeniu wartości 0.21 a.u. Te wstępne analizy sugerują, że stabilizacja stanu rodnikowego w produkcie przejściowym, lub powiązana z nią niska bezwzględna twardość, sprzyja obniżeniu stereoselektywności reakcji.

Drugi nurt badań obejmował badanie reakcji metalacji cynkiem i platyną ośmiu pochodnych chlorofili, w których modyfikowano pierścień tetrapirolowy i jego podstawniki. Stwierdzono, że na szybkość badanego procesu wpływa: wielkość układu  $\pi$ -elektronowego, sztywność pierścienia, obecność podstawników. Szczególnie ten ostatni czynnik wydaje się drastycznie obniżać powinowactwo makrocyklu do jonów metalu, co związane jest z obniżeniem gęstości elektronowej na atomach azotu porfiryny i, poprzez wymuszenie silnych oddziaływań sterycznych, zwiększeniem jego sztywności. Dane kinetyczne wskażą, że dużą rolę odgrywa również rozpuszczalnik, w którym przeprowadzana jest reakcja: kompleksując jony metali, ułatwia ich wprowadzenie do pierścienia makrocyklu.

## **4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów**

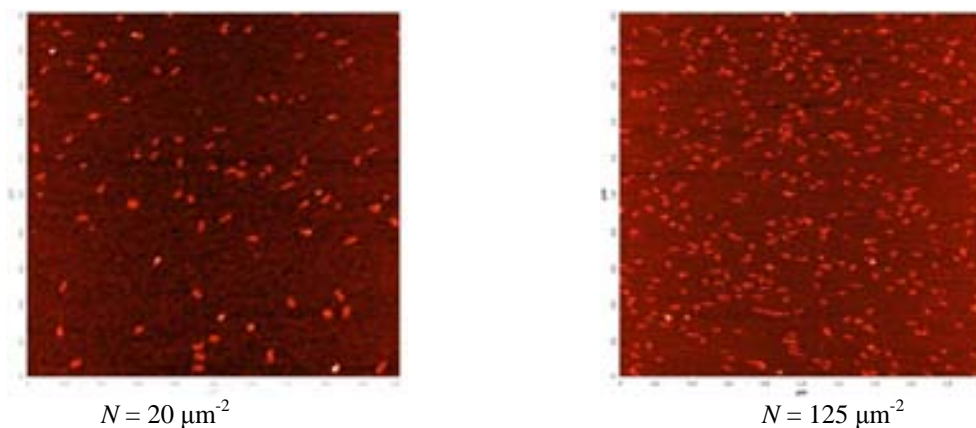




#### 4.1. Określenie topologii monowarstw białek globularnych na powierzchniach heterogenicznych przy pomocy metody potencjału przepływu, osadzania cząstek koloidalnych oraz mikroskopii oraz AFM

(prof. Zbigniew Adamczyk, mgr Monika Wasilewska, dr Małgorzata Nattich, dr Jakub Barbasz, dr Barbara Jachimska)

W ramach zadania badawczego przeprowadzono obszerne pomiary kinetyki adsorpcji oraz konformacji cząsteczek fibrynogenu (Fb) na powierzchni miki, jednego z najważniejszych białek osocza krwi, odpowiedzialnego za zjawiska krzepnięcia. W celu doboru optymalnych parametrów dla pomiarów adsorpcji Fb, wyznaczono jego współczynnik dyfuzji oraz ruchliwość elektroforetyczną w funkcji siły jonowej oraz pH. Na podstawie tych pomiarów, wyznaczono efektywny (nieskompensowany) ładunek powierzchniowy białka, jak również jego punkt izoelektryczny. Tak więc, dla  $\text{pH} < 5.8$  cząsteczki Fb posiadały dodatni ładunek powierzchniowy, osiągający maksymalną wartość, równą 34 ładunkom elementarnym dla  $\text{pH}$  ok. 3.5. To istotne spostrzeżenie wskazuje, że dla tego zakresu pH cząsteczki Fb mogą ulegać adsorpcji na powierzchniach o ujemnym ładunku, np. na powierzchni miki, której właściwości elektrokinetyczne zostały określone przy pomocy metody potencjału przepływu. W następnym etapie prac przeprowadzono pomiary kinetyki adsorpcji Fb na powierzchni miki dla  $\text{pH}=3.5$  oraz różnych sił jonowych. Pomiary prowadzono w warunkach transportu dyfuzyjnego przy użyciu bezpośredniej metodyki opartej na mikroskopii AFM (semi-contact mode). Przykładowa monowarstwa cząsteczki fibrynogenu na powierzchni miki o stężeniu powierzchniowym  $N=20$  oraz  $125 \text{ } [\mu\text{m}^{-2}]$ , uzyskane przy użyciu tej techniki pokazano na Rysunku 1. Wyznaczając na podstawie zdjęć AFM, zależność  $N$  od czasu adsorpcji fibrynogenu można określić w ilościowy sposób kinetykę adsorpcji tego białka. To umożliwia z kolei wyznaczenie jego stężenia objętościowego na poziomie poniżej 1 ppm, co nie jest możliwe przy użyciu metod chemicznych, dotychczas stosowanych w literaturze.



Rys. 1. Monowarstwy fibrynogenu na powierzchni miki o różnym stężeniu powierzchniowym  $N$  (osadzone z roztworów wodnych,  $\text{pH} = 3.5$ ,  $I = 10^{-2} \text{ NaCl}$ ). Zdjęcie wykonane przy pomocy mikroskopii AFM (semi-contact mode)

Ponadto, pomiary AFM pozwalają na wyznaczenie nie tylko stężenia powierzchniowego cząstek, lecz również na określenie konformacji cząsteczek białka oraz jego rozmiarów (długości i przekroju poprzecznego). W ten sposób potwierdzono, że cząsteczka fibrynogenu na powierzchni zachowuje silnie anizotropowy kształt o rozmiarach  $47 \times 6 \times 6 \text{ nm}$ .

## 4.2. Wpływ siły jonowej i pH na profile prędkości lokalnych pęcherzyków gazowych w roztworach surfaktantów anionowych

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

Celem badań było określenie wpływu stężenia surfaktantów anionowych oraz zmian pH i siły jonowej środowiska na parametry ruchu pęcherzyków gazowych. Opór lepkościowy wywierany przez ośrodek ciągły indukuje nierównowagowe rozłożenie zaadsorbowanych molekuł na powierzchni poruszającego się pęcherzyka. W stanie stacjonarnym, tj. kiedy pęcherzyk zaczyna się poruszać ze stałą prędkością (prędkość graniczna), na jego powierzchni zostaje wytworzona dynamiczna struktura warstwy adsorpcyjnej (DAL - Dynamic Adsorption Layer). Wyindukowanie DAL oznacza, że stężenie powierzchniowe zaadsorbowanych molekuł jest minimalne na górnym biegunie wypływającego pęcherzyka, podczas gdy stężenie na jej dolnym biegunie jest wyższe od równowagowego. Konsekwencją w/w gradientu stężenia powierzchniowego jest wystąpienie gradientów napięcia powierzchniowego, które powodują stopniowo (w zależności od wielkości pokrycia adsorpcyjnego) zmniejszanie ruchliwości powierzchni międzyfazowej pęcherzyka, aż do całkowitego jej unieruchomienia. Wskutek zmniejszenia ruchliwości powierzchni międzyfazowej zwiększa się opór hydrodynamiczny i prędkość wypływających pęcherzyków maleje.

Badano wpływ dynamicznej warstwy adsorpcyjnej (DAL) na prędkości lokalne, graniczne, deformacje i rozmiar pęcherzyków. Profile prędkości lokalnych, tj. zależności prędkości od odległości od kapilary, wyznaczano dla pęcherzyków gazowych w roztworach sulfonianów n-alkilosodowych i n-alkanianów sodowych (C8, C10, C12). Wykazano, że profile prędkości pęcherzyków zależą bardzo silnie od stężenia badanych surfaktantów anionowych, zwłaszcza w obszarze najniższych stężeń. W czystej wodzie oraz w stężonych roztworach badanych surfaktantów anionowych pęcherzyki przyspieszały, aż do osiągnięcia stałej wartości prędkości granicznej. Prędkość graniczna dla pęcherzyków poruszających się w czystej wodzie wynosiła  $34.8 \pm 0.3$  cm/s, wartość ta malała do ok. 15 cm/s dla roztworów o dużym stężeniu badanego surfaktanta. W przypadku niskich stężeń początkowe przyspieszenie pęcherzyka prowadzi do maksimum na profilach prędkości lokalnych, po którym następuje etap spowalniania prędkości, aż do osiągnięcia wartości stałej prędkości granicznej. Wysokość, szerokość i pozycja wspomnianego maksimum zmniejszają się wraz ze wzrostem stężenia badanej substancji. Obecność dodatkowego elektrolitu lub/ oraz zmiana pH wpływają znacząco na prędkości baniek, w każdym z badanych surfaktantów anionowych. W przypadku sulfonianów n-alkilosodowych dodatek 0.05 M elektrolitu (NaCl/KCl/NaOH/KOH/HCl) lub zmiana pH (pH 2-11) prowadzą do drastycznych zmian na obserwowanych profilach prędkości; zanikają maksima, a prędkości graniczne osiągane są bezpośrednio po etapie przyspieszenia. Zjawisko to związane było ze znaczną zmianą wielkości adsorpcji na powierzchni międzyfazowej w obecności elektrolitu. Obliczenia numeryczne wykazały, że stopień pokrycia powierzchniowego wystarczający do pełnego unieruchomienia powierzchni międzyfazowej pęcherzyka dla niejonowych i jonowych form kwasu n-oktylowego zmieniał się od 2 % dla formy niezdysocjowanej do 10 % w przypadku pełnej dysocjacji (pH 10). Potwierdza to, że obserwowany efekt jest związany z wielkością pokryć adsorpcyjnych i kinetyką adsorpcji surfaktantów.

## **5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe**

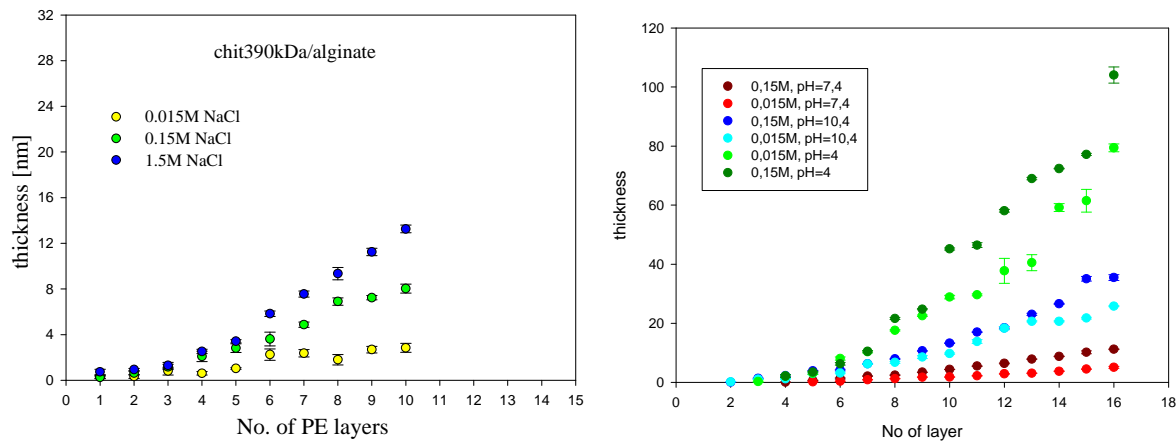


## 5.1. Cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanocząstkami i proteinami

(prof. Piotr Warszyński, dr Marta Kolasińska-Sojka, mgr Magdalena Elżbiaciak-Wodka)

Celem zadania było określenie optymalnych warunków tworzenia wielowarstwowych filmów polielektrolitowych ze względu na rodzaj polianionów i polikationów, siły jonowej i pH roztworu na grubość i strukturę filmów pod kątem wbudowywania jonoselektywnych znaczników fluorescencyjnych nanoznaczników typu kropek kwantowych, elektroaktywnych nanocząstek lub protein. Do tworzenia filmów wielowarstwowych zostały użyte syntetyczne, biokompatybilne polielektrolity poli-L-lizyna (PLL-polikation), poli-kwas glutaminowy (PGA-polianion), jak i polielektrolity pochodzenia naturalnego, polianiony: alginina, karagenian, oraz polikationy chitosan, arginina. Tworzono również różne kombinacje naturalnych i syntetycznych polielektrolitów. Filmy wielowarstwowe były nakładane metodą sekwencyjnej adsorpcji z roztworów o stężeniu 100 ppm w warunkach różnej siły jonowej i pH roztworów. Badano również efekt prekursorowej warstwy utworzonej z rozgałęzionego polikationu (PEI - polietylenoiminy) na grubość i przepuszczalność filmów.

Podobnie jak w przypadku polielektrolitów syntetycznych, grubość wielowarstwowych filmów tworzonych z polielektrolitów naturalnych rośnie wraz ze wzrostem siły jonowej roztworów, z jakich makromolekuły są nakładane. Ponieważ polielektrolity naturalne są w większości polielektrolitami słabymi o grubości formowanych filmów decyduje również pH roztworów. Dla przykładu pokazanego na Rysunku 1, w przypadku pary PLL/PGA największą grubość warstw obserwuje się przy pH=4, gdy stopień jonizacji PGA jest niski, a najmniejszą przy pH=7.4, gdy oba polielektrolity są silnie naładowane. Dla pary chitosan/alginina optymalne warunki dla tworzenia multiwarstw występują w granicach pH=4-7.



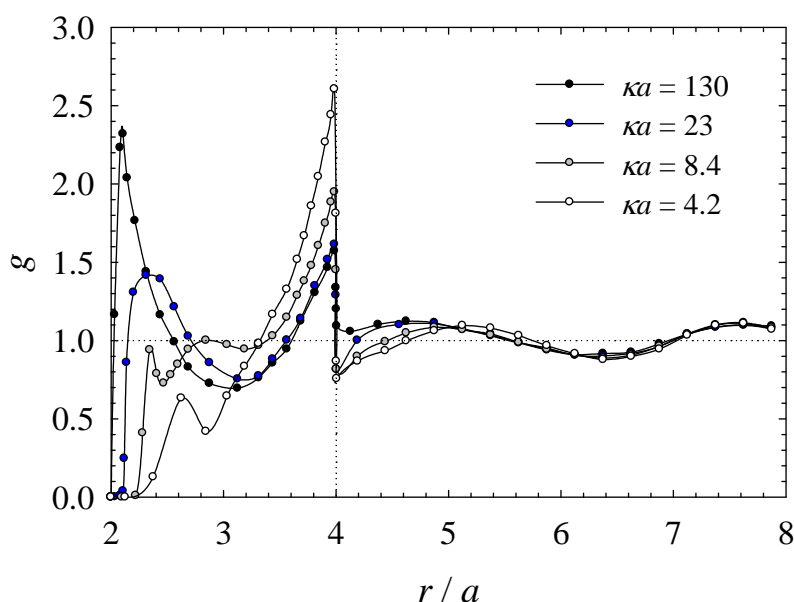
Rys. 1. Zależność elipsometrycznej grubości filmów wielowarstwowych chitosan/alginina (po lewej) i PLL/PGA (po prawej) od liczby nakładanych warstw w warunkach różnej jonowej i pH

Przepuszczalność filmów polielektrolitowych była określana metodą woltamperometrii cyklicznej przy użyciu elektroaktywnych cząsteczek różniących się rozmiarem. Określono również właściwości filmów zawierających nanocząstki błękitu pruskiego w połączeniu z chitosanem.

## 5.2. Modelowanie adsorpcji nanocząstek – teoretyczny opis przypadkowej adsorpcji sekwencyjnej cząstek kulistych z uwzględnieniem krzywoliniowej trajektorii i ruchów Browna

(dr hab. Paweł Weroński, prof. IKiFP PAN, mgr Magdalena Nosek, mgr Piotr Batys)

Opracowany wcześniej model teoretyczny adsorpcji wielowarstwowej miękkich (oddziaływujących elektrostatycznie) cząstek koloidalnych CT-RSA został zastosowany do symulacji adsorpcji cząstek koloidalnych metodą warstwa po warstwie. W wyniku symulacji komputerowych wygenerowane zostały wielowarstwowe struktury kulistych cząstek koloidalnych o rozmiarach rzędu mikrona. Symulacje przeprowadzone zostały dla wybranych wartości stężenia powierzchniowego cząstek pierwszej warstwy i dla kilku wartości siły jonowej roztworu. Otrzymane struktury zostały opisane ilościowo za pomocą dwu- i trójwymiarowych funkcji korelacyjnych, a także za pomocą funkcji rozkładu gęstości wielowarstwy. Uzyskane wyniki wskazują, że porowatość wielowarstwy syntezowanej w roztworze o mniejszej sile jonowej jest wyższa. Analiza struktury wielowarstwy wskazuje również, że ze wzrostem stężenia powierzchniowego cząstek pierwszej warstwy zanikają półkuliste klasterki cząstek, a geometria struktury wielowarstwy staje się płaska. Przeprowadzono szczegółową analizę obliczonych funkcji korelacyjnych i zidentyfikowano charakterystyczne odległości między zaadsorbowanymi cząstkami, dla których występują minima i maksima gęstości prawdopodobieństwa adsorpcji cząstek. Zidentyfikowano również najbardziej i najmniej prawdopodobne konfiguracje cząstek, odpowiadające ekstremom funkcji korelacyjnych. Na Rysunku przedstawiono porównanie trójwymiarowych funkcji korelacyjnych otrzymanych dla wielowarstw syntezowanych w roztworach o różnej sile jonowej, reprezentowanej przez parametr  $\kappa a$ .



## **6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**





## **6.1. Monitorowanie stanu powierzchni obiektów zabytkowych przy zastosowaniu metod optycznych**

*(prof. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, dr Leszek Krzemień, dr Michał Łukomski, mgr Łukasz Lasyk)*

W roku 2010 kontynuowano zadanie statutowe z roku 2009 polegające na rozwoju metod optycznych do monitorowania i śledzenia rozwoju uszkodzeń dekorowanych powierzchni obiektów zabytkowych. Rozwój nieinwazyjnych, bezkontaktowych metod analitycznych jest bardzo ważnym zadaniem dla nauki wspierającej konserwację, szczególnie, że dzieła sztuki są z reguły bardzo wrażliwe i równocześnie bardzo cenne.

W okresie sprawozdawczym prowadzono dalsze prace nad rozwojem interferometrycznych metod analizy stanu zachowania powierzchni polichromowanego drewna. Szczególnie ważne, w kontekście rozwoju metod optycznych, okazały się wyniki pomiarów lokalnego pola odkształceń podłoża drewnianego pod wpływem przyłożonej siły lub zmian wilgotności względnej w otoczeniu próbki. Pomiary wykonane przy pomocy metody korelacji obrazów pokazały, że struktura mikropęknięć gruntu malarskiego jest silnie skorelowana z rozkładem przyrostów rocznych w drewnie, stanowiącym podłoże obrazu. Aby precyzyjnie śledzić tę korelację zdecydowano się na rozbudowę interferometru plamkowego (oraz oprogramowania analizującego otrzymywane obrazy interferencyjne) tak, aby możliwe było wykonywanie pomiarów odkształceń powierzchni w kierunku prostopadłym do osi optycznej urządzenia. Wstępne wyniki pomiarów uzyskane przy pomocy interferometru pokazują, że minimalna i maksymalna wartość lokalnego odkształcenia drewna lipowego jest taka sama niezależnie, czy jest ono wywołane przyłożoną siłą zewnętrzną, czy zmianą wilgotności względnej. Oznacza to, że mechaniczne symulowanie procesów zmęczeniowych wywołanych powtarzającymi się zmianami wilgotności względnej w otoczeniu obiektu jest procedurą poprawną, odzwierciedlającą rzeczywiste zachowanie obrazów na desce.

Dalsze testy kalibracyjne, oraz pomiary na próbkach różnych gatunków drewna są konieczne do szczegółowego określenia krytycznych wahań klimatycznych prowadzących do uszkodzenia drewna polichromowanego.



## **PROJEKTY BADAWCZE WŁASNE**



# 1. Mechanizm działania katalizatorów "nano-Au/tlenek" w reakcjach utleniania CO

Projekt badawczy N204 089 32/2633 [2007-2010]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Katalizatory typu nano-Au/tlenek były intensywnie badane w ostatniej dekadzie, po stwierdzeniu przez Hatutę ich wysokiej aktywności w utlenianiu CO, nawet w niskich temperaturach. Jako nośnik używano też tlenków żelaza, chociaż istnieją silne przesłanki, że powierzchniowa stechiometria takiego nośnika odpowiada  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Ten fakt był motywacją dla podjęcia badań modelowych i proszkowych katalizatorów bazujących na Au/  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ .

Oddziaływanie klaster-nośnik w modelowym Au- $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  był badany z zastosowaniem skaningowej mikroskopii tunelowej (STM), fotoemisji wzbudzonej promieniowaniem X oraz spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji (CEMS), *in situ* w warunkach ultra wysokiej próżni. Złoto nanoszone było na powierzchnię epitaksjalnych warstw  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  na MgO, która miała tzw. terminację oktaedryczną. Analiza STM pokazała wzrost dwu- i trójwymiarowych klasterów Au, przy czym faza dwuwymiarowej nukleacji kończy się przy pokryciu ok. 0,3 monowarstwy Au, po czym dominuje wzrost trójwymiarowy. Dla najmniejszych klasterów zaobserwowano dodatnie przesunięcie energii wzbudzenia poziomów rdzenia Au 4f. Źródłem tego stosunkowo niewielkiego (0,4 eV) przesunięcia BE są trzy różne efekty: dodatnie ładowanie się klasterów w wyniku fotojonizacji (tzw. efekt stanu końcowego) i oddziaływanie klaster-nośnik oraz tzw. efekt powierzchniowy dający ujemne przesunięcie. Efekty te prowadzą do modyfikacji struktury elektronowej, która jest kluczowa dla aktywności katalitycznej. W oparciu o pomiary mössbauerowskie stwierdzono, że dla układu Au- $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  modyfikacja ta polega na transferze ładunku pomiędzy klasterem a nośnikiem, co skutkuje przesunięciem walencyjności atomów Fe do niższego stanu utlenienia.

Znamiennym jest, że dla przewodzącej powierzchni  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  przepływ ładunku obejmuje powierzchnię znacznie większą od tej, jaka zajmowana jest przez klaster Au. Z drugiej strony, lokalnie na granicy klaster-nośnik, w wyniku sąsiedztwa z atomami Au atomy Fe uzyskują metaliczny charakter. Wszystko to oznacza transfer elektronów z klasterów do nośnika i dodatnie się ich ładowanie. Transfer ten jest samoograniczający się przez zdolność akceptowania elektronów przez jony Fe oraz przez liczbę tych jonów, które mogą uczestniczyć w procesie, a które muszą znajdować się w sąsiedztwie klasterów Au i w związku z tym, wraz ze wzrostem klasterów, dodatni ładunek przypadający na atom złota maleje. To tłumaczy, dlaczego tylko najmniejsze klasterki są katalitycznie aktywne.

Równolegle badane były proszkowe katalizatory nano-Au/ $\text{FeO}_x$  otrzymywane w procesie depozycji-precypitacji złota w temperaturze pokojowej i pH= 9,5 – 10 z wodnego roztworu  $\text{AuCl}_3$  (5.0 wt % Au) oraz z amoniakiem jako czynnikiem wytrącającym. Różne stany redukcji nośnika uzyskane były przez kalcynację prekursora w powietrzu i w argonie w temperaturze 350°C i 400°C. Katalizatory były badane w reakcji utleniania CO i charakteryzowane z użyciem dyfrakcji rentgenowskiej, spektroskopii mössbauerowskiej i XPS oraz transmisyjnej mikroskopii elektronowej. Proces kalcynacji miał istotny wpływ na skład fazowy nośnika i niewielki na morfologię klasterów Au. Aktywność katalityczna katalizatorów Au/ $\text{FeO}_x$  w reakcji utleniania CO była wyższa dla katalizatorów wygrzewanych w powietrzu oraz poprawiała się w wyniku traktowania wodorem. Struktura i właściwości katalizatorów Au/ $\text{FeO}_x$  zmieniały się istotnie pod wpływem mieszanki reakcyjnej ( $\text{CO}+\text{O}_2$ ).

## 2. Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych w samoorganizujących się układach do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów

Projekt badawczy N 204 12232/3142 [2007-2010]

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

Badania składały się z dwóch etapów. W pierwszym zsyntezowano ok. 30 związków makrocyklicznych: porfiryn, ftalocyjanin, salenów i ich metalokompleksów oraz nieorganicznych metalokompleksów (heteropolizwiązków), które poddano heterogenizacji. Nośnikami były polielektrolity: chitosan, alginina i liposomy. Otrzymane katalizatory scharakteryzowano za pomocą technik fizykochemicznych: spektroskopii UV-Vis, FT-IR, kalorymetrii DSC, pomiarów wielkości pęcherzyków liposomowych (metodą DLS) oraz pomiarów potencjału zeta. Badania te potwierdziły syntezy wybranych ligandów i metalokompleksów.

W drugim etapie zbadano właściwości katalityczne otrzymanych metalokompleksów i ich heterogenizowanych pochodnych w procesach epoksydacji cykloheksenu i utleniania cyklooktanu. Reakcję epoksydacji cykloheksenu prowadzono w obecności donoru tlenu (NaOCl) w układzie jednofazowym. Katalizatorami były anionowe kompleksy ftalocyjaninowe: FePcS, MnPcS, CoPcS, CuPcS, NiPcS i kompleksy porfirynowe: FeTPPS, MnTPPS, CoTPPS, a także w/w kompleksy wprowadzone do liposomów. Produktami reakcji epoksydacji cykloheksenu są: tlenek propylenu, 2-cykloheksen-1-ol i 2-cykloheksen-1-on. Wszystkie katalizatory były aktywne w badanej reakcji; ich wydajność i selektywność zależy od struktury makrocyklicznego ligandu i rodzaju centrum metalicznego. W przypadku katalizatorów porfirynowych najwyższą aktywność wykazała porfiryne manganowa; także po wprowadzeniu do liposomu. Immobilizacja makrocyklicznych kompleksów w nośnikach liposomowych (zapobiegająca dimeryzacji katalizatorów) spowodowała znaczny wzrost ich aktywności katalitycznej. Spośród katalizatorów ftalocyjaninowych zarówno przed, jak i po immobilizacji w pęcherzykach liposomowych również kompleksy manganu MnPcS i MnPcS/liposom były najbardziej aktywne. Kompleksy metaloftalocyjaninowe okazały się bardziej aktywnymi katalizatorami niż kompleksy metaloporfirynowe.

W przypadku utleniania cyklooktanu czynnikiem utleniającym był tlen cząsteczkowy. Katalizatorami były anionowe metaloporfiryny FeTPPS, MnTPPS, CoTPPS, anionowe metaloftalocyjaniny FePcS, MnPcS, CoPcS, sole kobaltowe kwasu fosforowolframowego i fosfomolibdenowego - naniesione na chitosan oraz kationowe metaloporfiryny MnTMPyP, FeTMPyP, CoTMPyP naniesione na algininę. Zbadano także właściwości katalityczne kompleksów nienaniesionych. Produktami tej reakcji był cyklooktanon i cyklooktanol. Wszystkie katalizatory wykazują aktywność katalityczną w badanej reakcji. Dla porfiryn anionowych, jak i dla anionowych ftalocyjanin najbardziej aktywnymi katalizatorami są kompleksy kobaltu. Stwierdzono, że aktywność katalityczna metaloporfiryn anionowych wzrasta wraz z obniżeniem potencjału zeta wg kolejności CoTPPS > MnTPPS > FeTPPS. Podobny szereg aktywności otrzymano dla metaloftalocyjanin: CoPcS > MnPcS > FePcS. W przypadku metaloporfiryn kationowych najwyższą aktywność wykazuje kompleks manganu MnTMPyP. Dla naniesionych metaloporfiryn kationowych aktywność katalityczna wzrasta wraz ze wzrostem dodatniego ładunku potencjału zeta: MnTMPyP > CoTMPyP > FeTMPyP. Pokazano także, że struktura makrocyklicznego pierścienia i rodzaj centrum metalicznego mają wpływ na selektywność reakcji. Sole kobaltowe kwasu fosfomolibdenowego są bardziej aktywne niż sole kobaltowe kwasu fosforowolframowego. Po naniesieniu na chitosan aktywność katalityczna wszystkich heteropolizwiązków nieznacznie spada.

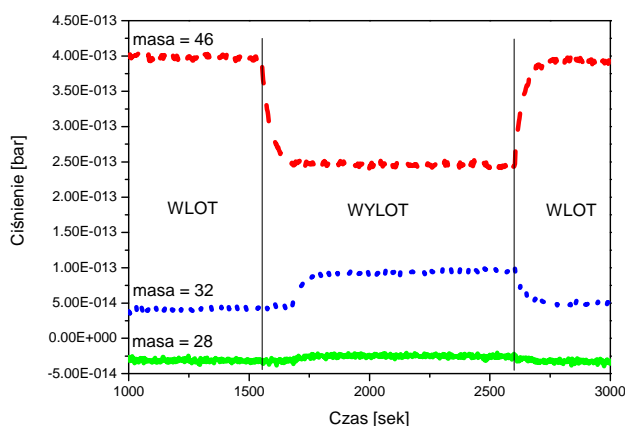
### 3. Wpływ atomu centralnego (P, Si) oraz atomu addenda (W, Mo) w solach srebrowych heteropolikwasów o strukturze Keggina na bezpośredni rozkład tlenków azotu NO<sub>x</sub>

Projekt badawczy N N204 1494 33 [2007-2010]

(kierownik projektu: dr Tadeusz Machej)

W 2010 roku zostały zakończone testy katalityczne obejmujące utlenianie NO do NO<sub>2</sub> oraz bezpośredni rozkład NO<sub>x</sub> na solach srebrowych Ag<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>, Ag<sub>3</sub>PMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>, Ag<sub>4</sub>SiW<sub>12</sub>O<sub>40</sub>, Ag<sub>4</sub>SiMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>. Rezultaty badań katalitycznych wyraźnie pokazały, że sole srebrowe heteropolikwasów utleniają tlenek azotu do ditlenku azotu w temperaturze pokojowej. W dodatku, konwersje osiągnięte w obecności pary wodnej są wyższe od tych uzyskanych w atmosferze bezwodnej. Największą konwersję wykazały sole Ag<sub>3</sub>PMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>, Ag<sub>4</sub>SiW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> oraz Ag<sub>4</sub>SiMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>. Wyniki te można skorelować z wielkościami sorpcji ditlenku azotu, gdyż sole wykazujące się największą konwersją są również najlepszymi sorbentami ditlenku azotu. Można więc przypuszczać, że powstający w reakcji utleniania NO ditlenek azotu jest sorbowany przez sól srebrową i w ten sposób równowaga reakcji przesuwana jest w kierunku jego tworzenia. Stąd wydaje się, że znaczącą rolę powinna odgrywać szybkość dyfuzji ditlenku azotu do centrów, na których jest sorbowany. Przeprowadzone odpowiednie badania potwierdziły, że etapem limitującym reakcję utleniania NO do NO<sub>2</sub> jest proces dyfuzji do wnętrza soli. Jest to tym bardziej prawdopodobne, że sole te charakteryzują się bardzo małą powierzchnią właściwą.

Wykonano także badania bezpośredniego rozkładu tlenków azotu w atmosferze beztlenowej, w obecności tlenu oraz w obecności tlenu i pary wodnej. Otrzymane wyniki wskazują, że sole srebrowe heteropolikwasów są aktywne w rozkładzie ditlenku azotu, co obrazuje



zamieszczony obok rysunek. Natomiast, rozkład tlenku azotu przebiega tylko w obecności tlenu, który pozwala na utlenienie go do ditlenku azotu, który następnie ulega rozkładowi. Dodatni wpływ na reakcję rozkładu NO<sub>x</sub> ma obecność pary wodnej. Niestety, reakcja rozkładu NO<sub>x</sub> na solach srebrowych heteropolikwasów jest limitowana przez dyfuzję wewnętrzną, w szerokim zakresie GHSV 600 - 6000h<sup>-1</sup>, co uniemożliwia ich zastosowanie w badanej reakcji.

Przedstawione powyżej wyniki również wskazują na możliwość rozwiązania tego problemu, którym mogłoby być zsyntezowanie soli srebrowych o rozwiniętej powierzchni właściwej.

Z wykonanego projektu badawczego sporządzono raport końcowy, który został przyjęty przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego.



#### 4. Kompleksy surfaktantów kationowych o złożonej strukturze cząsteczkowej z polimerami jonowymi jako elementy budowy nanostruktur

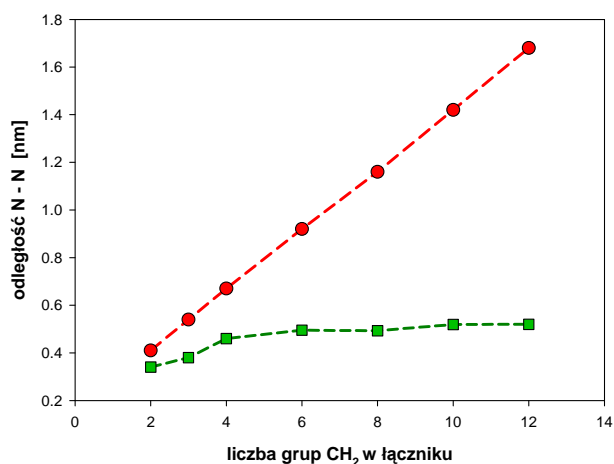
Projekt badawczy N N204 2486 34 [2008-2011]

(kierownik projektu: dr Grażyna Para)

Badano wpływ struktury molekularnej na adsorpcję surfaktantów kationowych zawierających dwa łańcuchy węglowodorowe: bromku didodecyldimetylo-amoniowego (dDDABr) i surfaktantów kationowych typu gemini bromków  $N,N,N',N'$ -tetrametylo- $N,N'$ -di(dodecylo)-alkylenodiamoniowego ( $d(\text{DDA})\text{XBr}$ ), posiadających dwie grupy dodecyldimetyloamoniowe połączone łącznikiem  $(-\text{CH}_2)_n$  oraz ich oddziaływania z polianionem: polistyrenosulfonianem sodowym (PSS). Strukturę molekularną badanych surfaktantów analizowano w oparciu o symulację dynamiki molekularnej Langevin'a stosując pole sił AMBER99 i oprogramowanie do modelowania Hyperchem 8.0. Dynamiczne napięcie powierzchniowe roztworów soli amoniowych mierzono metodą analizy kształtu kropli. Otrzymane wyniki interpretowano za pomocą modelu adsorpcji quasidwuwymiarowego elektrolitu (STDE). Aktywność powierzchniowa badanych surfaktantów typu gemini mieści się, z powodu ich podwójnego ładunku, pomiędzy aktywnością surfaktantów dialkiloamoniowych i monoalkiloamoniowych. Można zauważyć, że cmc dialkilodiamoniowych surfaktantów początkowo rośnie (aż do długości łącznika  $(\text{CH}_2)_6$ ), a następnie maleje ze wzrostem długości łącznika. Stosując symulację metodą dynamiki molekularnej potwierdziliśmy, że zależność ta może być wyjaśniona giętkością łańcucha łącznika.

Rysunek 1 obrazuje zależność odległości pomiędzy atomami azotu N-N od ilości grup  $(-\text{CH}_2)-$  w łączniku dla najbardziej rozwiniętej (kółka) i maksymalnie pofałdowanej (kwadraty) konformacji. Można wnioskować, że minimalna odległość pomiędzy grupami amoniowymi rośnie od 2 do 6, a następnie dla dłuższego łącznika, wydaje się być stała, co oznacza, że stopień wygięcia łańcucha łącznika wzrasta. Symulacja dynamiki molekularnej potwierdza, że ten efekt jest spowodowany wzrostem elastyczności długiego łańcucha łącznika, który może być wyeksponowany do powierzchni, poza fazę wodną.

Stosując różne typy badanych surfaktantów kationowych utworzono kompleksy surfaktant – polielektrolit (PSS) w układach micelarnych, które poddano enkapsulacji metodą layer-by-layer poprzez adsorpcję polielektrolitów (polikationu PDADMAC (chlorku polidiallilo dimetylo amoniowego) i polianionu PSS).



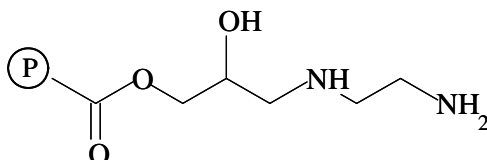
Rys. 1 Zależność odległości N-N od liczby grup  $(-\text{CH}_2)-$  w łączniku bromku  $N,N,N',N'$ -tetrametylo- $N,N'$ -di(dodecylo)-alkylenodiamoniowego liczone przy zastosowaniu symulacji metodą dynamiki molekularnej; kółka – łącznik maksymalnie rozwinięty, kwadraty – łącznik maksymalnie pofałdowany

## 5. Badanie heterogenizowanych chiralnych kompleksów rutenu w katalitycznym enancjoselektywnym uwodornieniu ketonów

Projekt badawczy N N204 2490 34 [2008-2011]

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

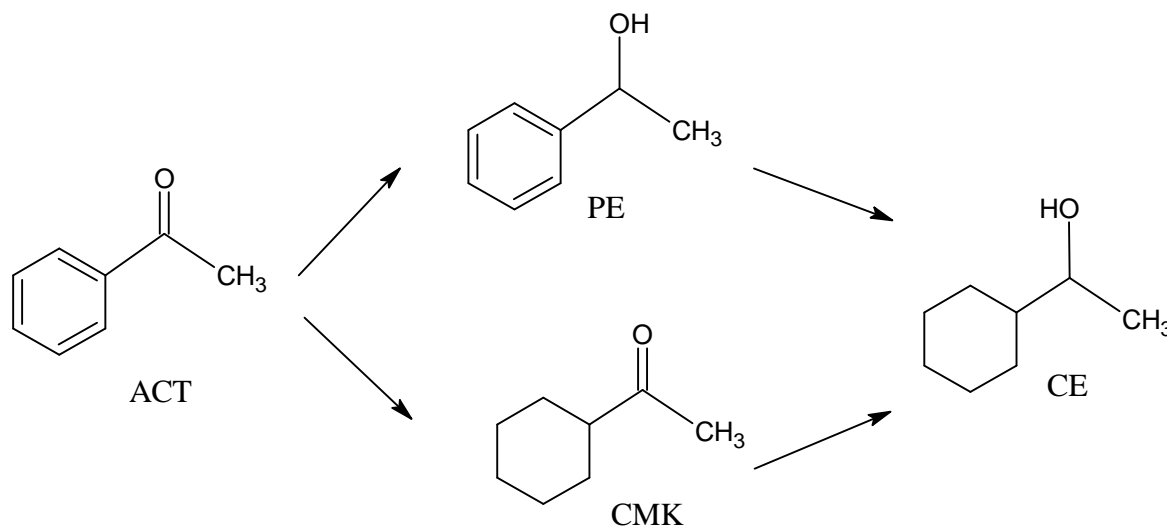
Katalizatory rutenowe osadzone na żywicy metakrylanowej FCN (Rysunek 1) wykazują wysoką aktywność i selektywność w reakcji uwodornienia grupy karbonylowej acetofenonu (Rysunek 2).



Rys. 1. Struktura żywicy FCN

W obecności katalizatora składającego się z 4 % fazy aktywnej (Ru) osadzonej na polimerze FCN, 1-fenyletanol (PE) tworzony jest z ok. 80 % selektywnością. Zasadniczą cechą stosowanego układu katalitycznego jest zastosowanie układu dwufazowego składającego się równych objętości wody i izooktanu. W takim układzie zachodzi preferencyjne uwodornienie grupy karbonylowej, a pierścień aromatyczny ulega reakcji w mniejszym stopniu. Rola układu dwufazowego polega solwatacji pierścienia fenyloвого acetofenonu przez niepolarny izooktan, co wpływa na orientację ketonu. To z kolei ułatwia adsorpcję polarnej grupy karbonylowej na powierzchni katalizatora i umożliwia zajście reakcji.

Katalizatory Ru/FCN odznaczają się wyższą selektywnością do PE w porównaniu z klasycznymi związkami Ru/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Jest to spowodowane przede wszystkim efektami sterycznymi wywołanymi obecnością łańcucha polimerowego, który „wymusza” odpowiednią orientację cząsteczki acetofenonu względem aktywnych centrów rutenowych.



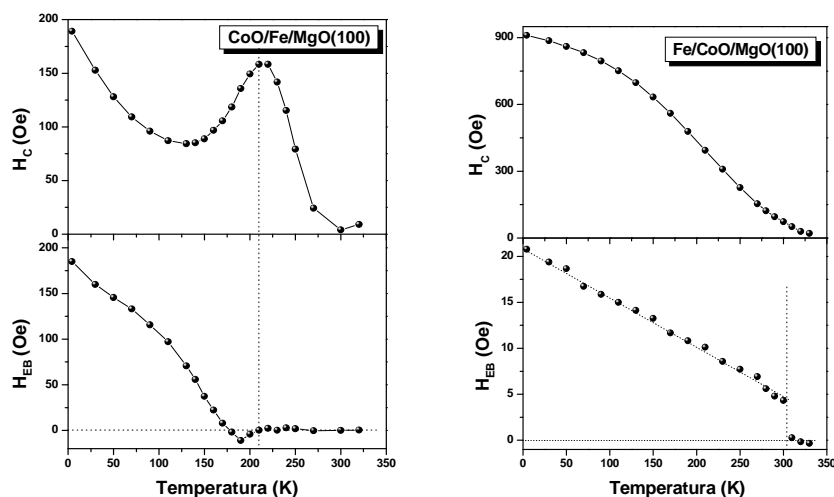
Rys. 2. Uwodornienie acetofenonu

## 6. Oddziaływanie wymienne typu "exchange-bias" w układach epitaksjalnie osadzanych metali 3d i 4f na polarnych i nie-polarnych podłożach tlenków metali przejściowych

Projekt badawczy N N202 248535 [2008-2011]

(kierownik projektu: dr Jacek Gurgul)

Kontynuowano badanie układów CoO/Fe/MgO(100) oraz Fe/CoO/MgO(100) otrzymywanych przy użyciu epitaksji z wiązki molekularnej (MBE). Szczególny nacisk położono na modyfikację interfejsów Fe/CoO i CoO/Fe. W tym celu przygotowano m.in. próbki Fe/CoO/MgO(100) z homoepitaksjalną warstwą MgO o grubości 50 Å, CoO/Fe-O(1x1)/MgO(100) z utlenioną warstwą żelaza oraz CoO/Co/Fe/MgO(100) z 2 Å warstwą kobaltu mającego zapobiec utlenianiu powierzchni żelaza. Jakość uzyskanych warstw sprawdzano na każdym etapie preparatyki dyfrakcją niskoenergetycznych elektronów LEED. Przygotowane próbki zostały następnie pokryte warstwą MgO o grubości 50 Å tak aby zapobiec modyfikacjom powierzchni podczas wykonywania *ex situ* pomiarów magnetycznych metodą VSM, pomiarów magnetoptycznego efektu Kerra (MOKE) oraz efektu Mössbauera dla jąder  $^{57}\text{Fe}$  (CEMS).



Szczegółowe badania magnetyczne pozwoliły na wyznaczenie zależności pola koercji  $H_C$  oraz pola „exchange-bias”  $H_{EB}$  w funkcji temperatury, co pokazano powyżej dla dwóch układów o różnych interfejsach. Analiza wyników potwierdziła fakt, że właściwości magnetyczne układów cienkowarstwowych ściśle zależą nie tylko od chemicznej struktury interfejsu ale związane są także ze strukturą warstw. W celu dokładniejszej analizy wpływu czynników strukturalnych na właściwości magnetyczne układów Fe-CoO wykonano badania CEMS na układach z dodatkową warstwą zawierającą izotop mössbauerowski  $^{57}\text{Fe}$ , gdzie odpowiednia procedura preparatyki próbek pozwoliła uzyskać informacje o oddziaływaniach nadsubtelnych w obszarze interfejsu. Otrzymane wyniki pokazują, że układy Fe/CoO charakteryzują się dużymi polami koercji, małymi polami  $H_{EB}$  oraz relatywnie wysoką temperaturą blokowania  $T_B \sim 290$  K, a czasami nawet przekraczającą temperaturę Néela CoO. Natomiast w interfejsie CoO/Fe obserwuje się małe pola koercji, duże pola  $H_{EB}$  oraz znacznie niższą temperaturę blokowania  $T_B < 260$  K. Warto tutaj dodać, że również charakterystyki temperaturowe  $H_C$  i  $H_{EB}$  są zasadniczo inne co jest związane ze stopniem utlenienia warstwy Fe w interfejsie Fe-CoO.

## 7. Molekularne mechanizmy determinujące specyficzność enzymów zależnych od 2-oksoglutatanu

Projekt badawczy N N301 093036 [2009-2011]

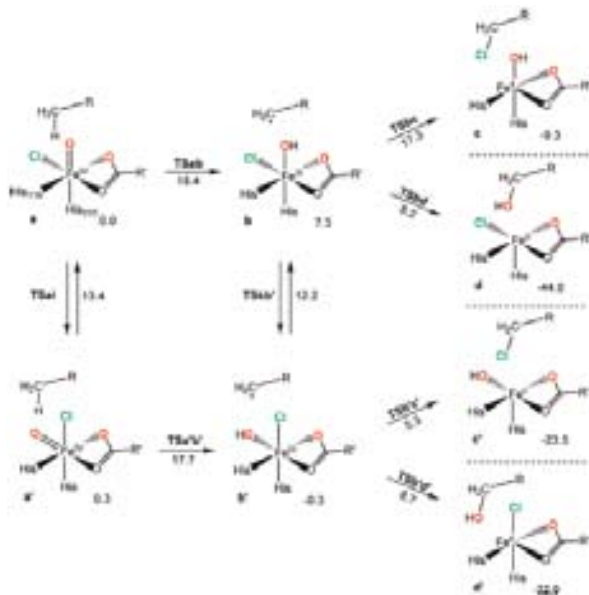
(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)

W ramach tego projektu przebadano zależną od 2-oksoglutaranu (2OG) halogenażę treoniny, znaną w literaturze pod nazwą SyrB2. Ten niehemowy enzym żelazowy katalizuje chlorowanie łańcucha bocznego treoniny, co jest jednym z etapów biosyntezy antybiotyku – syryngomycyny. Przeprowadzone badania teoretyczne rzuciły nowe światło na mechanizm katalityczny SyrB2.

Ponieważ nieznana jest wciąż struktura kompleksu SyrB2-substrat organiczny, badania nad tym układem rozpoczęto od symulacji dokowania molekularnego przy użyciu programu AutoDock. Wymodelowana struktura kompleksu posłużyła do skonstruowania modelu centrum aktywnego, którym posłużono się w badaniach kwantowo-chemicznych nad strukturą elektronową reaktywnego układu oksoferrylowego oraz mechanizmem reakcji.

Badając strukturę elektronową wykonano obliczenia DFT, CASPT2 oraz wyznaczono parametry widma Mossbauera dla dwóch zaproponowanych przez nas form kompleksu oksoferrylowego (a i a' na Rysunku 1) dla trzech możliwych multipletowości. Uzyskane wyniki pozwoliły na zinterpretowanie widm obserwowanych doświadczalnie.

Zidentyfikowanie dwóch form reaktywnego układu oksoferrylowego pozwoliło na postawienie hipotezy wyjaśniającej selektywne chlorowanie treoniny oraz hydroksylację niefizjologicznych substratów (patrz Rysunek 1). Hipoteza ta zakłada, że obie formy (a i a') mogą, z nieco różną wydajnością, aktywować wiązanie C-H, by następnie w sposób wysoce selektywny przyłączyć Cl lub OH do grupy alifatycznej substratu. Wyniki tych badań opublikowano w JACS.



Rys. 1. Zaproponowany mechanizm chlorowania i hydroksylacji L-Thr katalizowanych przez SyrB2

## **8. Opracowanie metody tworzenia biologicznie aktywnych multiwarstw zawierających polielektrolity-białka-dendrymery**

Projekt badawczy N N204 028536 [2009-20012]

*(kierownik projektu: dr Barbara Jachimska)*

Kontrolowane osadzanie cząstek koloidalnych ma potencjalne zastosowanie w produkcji nano i mikrostrukturalnych materiałów o pożądanej funkcjonalności. Zrozumienie i kontrola tych zjawisk może być osiągnięty tylko przy zdobyciu informacji na temat specyficznych oddziaływań między cząstkami w warunkach dynamicznych. Oddziaływania mogą być efektywnie badane przez osadzania modelowych cząstek na podłożu jednorodnym lub o kontrolowanej heterogeniczności powierzchni. Przez adsorpcji cząstek w ściśle określonych parametrach możliwa staje się kontrola stopienia heterogeniczności powierzchni. Dendrymery mogą być wykorzystane do wyjaśnienia mechanizmu adsorpcji białek i do kalibracji pośrednich metod pomiaru pokrycia powierzchni białka, takie jak: elipsometrii, reflektometria lub metody potencjału przepływu.

Charakterystyka poli (amido aminy) dendrymerów PAMAM w roztworze wodnym została przeprowadzona przez pomiar ich ruchliwości elektroforetycznej oraz współczynnika dyfuzji przy użyciu dynamicznego rozpraszanie światła (DLS). Pozwoliło to na określenie hydrodynamicznego promienia cząsteczki PAMAM oraz ich efektywnego ładunku. Te właściwości fizykochemiczne zostały uzupełnione przez pomiar lepkości dynamicznej. Na podstawie tych pomiarów udało się interpretować ich strukturę jako dense-core/dense-shell jak postulowano w literaturze przedmiotu. Szczegółowe badania adsorpcji dendrymerów PAMAM na powierzchni miki przeprowadzono za pomocą mikroskopu sił atomowych (AFM). Do określenia maksymalnego pokrycia oraz topologii warstw adsorpcyjnych, uzyskano informacje na temat dynamiki adsorpcji dendrymerów i interakcji między powierzchnią i cząsteczkami dendrymerów. Powyższe wyniki eksperymentalne uzyskane dla modelowego układu, jakim są dendrymery, mogą być użytecznie wykorzystane do analizy adsorpcji układów bardziej skomplikowanych, takich jak białka.

## 9. Nowe nanostrukturalne materiały węglowe, tlenkowe oraz kompozyty węglowo-tlenkowe do budowy superkondensatorów

Projekt badawczy N N507 269936 [2009-2012]

(kierownik projektu: dr inż. Aleksandra Pacuła)

1. Wykonano serię syntez materiałów o strukturze hydrotalkitu. Otrzymano preparaty różniące się zarówno składem chemicznym (kobaltowo-glinowe, niklowo-glinowe, kobaltowo-niklowo-glinowe) jak i stosunkiem atomowym kationów dwu i trójwartościowych wynoszącym 2 i 3, oraz w przypadku kobaltowo-niklowo-glinowych próbek różnym stosunkiem atomowym kobaltu do niklu wynoszącym 3:7, 5:5, 7:3. Analiza chemiczna wykonana metodą ICP OES potwierdziła, że próbki zawierają zamierzony udział poszczególnych pierwiastków metalicznych. Synteza preparatów polegała na strącania osadu za pomocą zasady sodowej przy stałym pH=10 z wodnego roztworu zawierającego zmieszane w odpowiedniej proporcji azotany kobaltu i/lub niklu oraz glinu. Hydrotermalną syntezę przeprowadzono w temperaturze pokojowej stosując 30 minutowe starzenie strąconego osadu. Analiza obrazów dyfrakcyjnych XRD potwierdziła, że próbki wykazują strukturę warstwową charakterystyczną dla hydrotalkitu, ponadto różnią się stopniem krystaliczności. Generalnie materiały o mniejszym stosunku atomowym kationów dwu i trójwartościowych ( $M^{2+}/M^{+3}=2$ ) są w mniejszym stopniu krystaliczne w porównaniu do materiałów o większym stosunku atomowym kationów dwu i trójwartościowych ( $M^{2+}/M^{+3}=3$ ). Niklowo-glinowe próbki wykazują większy stopień krystaliczności aniżeli analogiczne materiały zawierające kobalt. Kobaltowo-niklowo-glinowe materiały wykazują najmniejszy stopień krystaliczności spośród wszystkich próbek. Analiza termiczna potwierdziła różną stabilność termiczną proszkowych preparatów.
2. Wykonano serię syntez kompozytów węglowo-tlenkowych metodą CVD (chemical vapour deposition). Eksperymenty CVD przeprowadzono w poziomym piecu rurowym w przepływie gazu obojętnego. Preparatyka kompozytów polegała na ogrzewaniu materiałów o strukturze hydrotalkitu (Co/Al=2, Ni/Al=2) przez 30 minut w temperaturach 600, 700, 800°C, w przepływie argonu nasyconego parami acetonitrylu ( $CH_3CN$ ).
3. W wyniku traktowania kompozytów kwasem nieorganicznym otrzymano serię materiałów węglowych. W procesie usuwania z kompozytów ich niewęglowej komponenty zastosowano rozcieńczony kwas solny. Proces roztwarzania prowadzono przez 24 godziny wspomagając operację działaniem ultradźwięków.
4. Przeprowadzono charakterystykę fizykochemiczną kompozytów i materiałów węglowych obejmującą określenie składu fazowego i struktury za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD), spektroskopii fotoelektronów (XPS), powierzchni właściwej i porowatości metodą fizycznej sorpcji azotu.
5. Przeprowadzono charakterystykę właściwości elektrodowych otrzymanych materiałów za pomocą woltamperometrii cyklicznej w roztworze alkalicznym (0.1 M KOH). Zmierzono pojemność podwójnej warstwy elektrycznej próbek i sprawdzono ich aktywność elektrokatalityczną w reakcji redukcji tlenu.
6. Przygotowano plakat "Electrode Materials Containing Cobalt Species and Nitrogen-doped Carbon Nanotubes", który zaprezentowano podczas 61. Zjazdu Międzynarodowego Towarzystwa Elektrochemicznego w dniach 26 września-1 października 2010 w Nicei.

## **10. Emisja akustyczna do monitorowania obiektów muzealnych jako uniwersalna metoda prewencji konserwatorskiej**

Projekt badawczy N N105 278536 [2009-2012]

(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)

W drugim roku realizacji projektu dokończono rozbudowę posiadanej aparatury badawczej do pomiaru emisji akustycznej generowanej w trakcie pęknięcia obiektów zabytkowych. Polegało to na doborze odpowiedniego sprzętu opartego o wysokiej jakości system akwizycji sygnałów akustycznych, niskoszumny wzmacniacz oraz zestaw czujników czułych w zakresach częstotliwości pokrywających obszar 10-1000 kHz. Zakupiona aparatura została zintegrowana w jeden zestaw oraz oprogramowana w sposób umożliwiający skuteczną i efektywną analizę rejestrowanych sygnałów. Rozpoczęto także prace nad budową modułu automatycznej analizy sygnałów umożliwiającej wstępną analizę, klasyfikację i rejestrację sygnałów w warunkach pomiarów terenowych np. w przestrzeni wystawienniczej muzeum. Przeprowadzono prace nad dobraniem optymalnych parametrów wzmocnienia i filtracji niepożądanych częstotliwości. W ramach realizacji tego pakietu zadań przetestowano cały układ na przygotowanych wcześniej próbkach drewna oraz z użyciem standardowego testu Nielsona.

Przygotowano modelowe próbki materiałów imitujące obiekty zabytkowe takie jak gips, stutek zgodnie z procedurami historycznymi oraz drewno lipy, świerku, orzecha, dębu oraz topoli.

Rozbudowana aparatura została wykorzystana do scharakteryzowania zależności emisji akustycznej od gatunków drewna, kierunku przykładanego naprężenia w stosunku do kierunków anatomicznych oraz zawartości wilgoci w drewnie poddanych procesom niszczenia mechanicznego w uniwersalnej maszynie testującej. Otrzymane wyniki wskazały na silną zależność cech mechanicznych badanych materiałów od prędkości obciążania próbek związaną z zachodzącymi procesami relaksacyjnymi. Dla badanych materiałów wyznaczono charakterystyczne stałe czasowe procesów relaksacyjnych, co pozwoliło przeprowadzić i porównać wyniki pomiarów akustycznych wykonywanych dla obciążeń narastających „powoli” oraz „szybko”. Przeprowadzona analiza sygnałów akustycznych wskazała na brak zależności częstotliwości charakterystycznych od prędkości narastania naprężeń, co pozwoliło ustalić jedną procedurę pomiarową dla wszystkich materiałów.

Obok drewna scharakteryzowano także częstotliwości i kształt sygnałów akustycznych pochodzących z testów mechanicznych gipsu i stuteku.

Dla wszystkich badanych materiałów określono kluczowe parametry mechaniczne takie jak: moduł Younga, zakres odkształceń sprężystych, wytrzymałość oraz właściwości sorpcyjne badanych materiałów.

Obecnie prowadzone są pomiary wpływu rzeczywistych zmian parametrów środowiska, a w szczególności wilgotności względnej, na proces pęknięcia badanych materiałów. W tym celu przygotowano układ pomiarowy sprzężony z programowalną komorą klimatyczną wyposażoną w laserowy system pomiaru odkształceń. Równolegle prowadzone są pomiary emisji akustycznej.

Rozpoczęto też prace zmierzające do wyselekcjonowania odpowiednich obiektów referencyjnych w Muzeum Narodowym w Krakowie, na których będą prowadzone badania polowe emisji akustycznej.

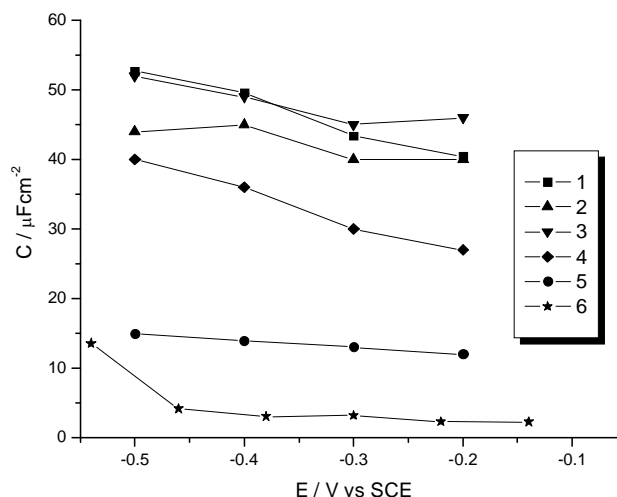
## 11. Kontrolowana adsorpcja, jako metoda zapobiegania zanieczyszczeniu środowiska w wyniku utleniania siarczków metali

Projekt badawczy N N523 451336 [2009-2011]

(kierownik projektu: dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN)

Odpady z przemysłu przeróbki minerałów oraz przemysłu metali nieżelaznych zawierają często metale w formie siarczków. Rozpuszczalność siarczków metali w wodzie jest bardzo niska, jednakże pozostawione na składowisku odpadów, w wyniku oddziaływania tlenu atmosferycznego oraz innych utleniaczy ulegają utlenieniu do związków o znacznie wyższej rozpuszczalności (siarczanów, węglanów, wodorotlenków) i w kontakcie z naturalnymi wodami uwalniają do środowiska jony metali. Utlenienie siarczku metalu może być traktowane jako proces korozji i, jak w przypadku korozji metali, można mu zapobiegać stosując inhibitory. Przedmiotem badań było wyselekcjonowanie związków chemicznych, które adsorbują się silnie na powierzchni siarczków metali tworząc warstewkę ochronną zabezpieczającą siarczek przed utlenieniem i mogłyby służyć jako inhibitory reakcji utleniania siarczków.

W badaniach użyto syntetycznego siarczku miedzi o składzie  $\text{Cu}_{1,87}\text{S}$ , otrzymanego z miedzi i siarki o wysokiej czystości a zbliżonego składem do niestechiometrycznych siarczków miedzi występujących w polskich rudach tego metalu oraz kilku naturalnych siarczków miedzi, a także pirytu i galeny wyselekcjonowanych z rud. Siarczki metali są dobrymi przewodnikami elektryczności, w badaniach zastosowano więc metody elektrochemiczne (głównie elektrochemiczną spektroskopię impedancyjną). Adsorpcję różnych związków, które mogłyby spełniać rolę inhibitorów reakcji utleniania siarczków metali badano mierząc pojemność podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz: siarczek / roztwór wodny badanej substancji. Badano adsorpcję następujących związków chemicznych: fosforanu, krzemianu, oleinianu, stearynianu, dodecylosiarczanu, bis(2-etyloheksylo)fosforanu i heksadecylosiarczanu sodu, alkoholu poliwinylowego, n-oktanolu, chlorku trimetylododecyloamoniowego i N-dodecylpirydyniowego, 2-merkaptobenzotiazolu, etyloksantogenianu potasowego oraz soli sodowej kwasu humusowego. Stwierdzono, że w obszarze potencjałów, jakie elektroda z siarczku miedzi przyjmuje w natlenionych roztworach wodnych powierzchnia siarczku miedzi ma ładunek ujemny w związku z czym adsorbują się na niej surfaktanty kationowe (Rysunek 1), ale fizyczna adsorpcja nie jest wystarczająca aby powstrzymać utleniające roztwarzanie siarczku. Skutecznymi inhibitorami okazały się substancje, które adsorbują się na powierzchni w wyniku zachodzenia procesu chemisorpcji bądź też tworzą pokrycia w wyniku zachodzenia reakcji powierzchniowej z powstawaniem nierozpuszczalnego produktu.



Rys. 1. Zależność pojemności podwójnej warstwy elektrycznej od potencjału dla elektrody z niestechiometrycznego siarczku miedzi w: 1 - roztworze elektrolitu podstawowego, ( $0,5 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3} \text{ Na}_2\text{SO}_4$ ), oraz w roztworach surfaktantów o stężeniu  $1 \text{ mmol} \cdot \text{dm}^{-3}$ : 2- dodecylosiarczanu sodu, 3 – oleinianu sodu, 4 – n-oktanolu, 5 – chlorku dodecylotrimetyloamoniowego, 6 – chlorku N-dodecylpirydyniowego.



## 12. Teoretyczna i eksperymentalna analiza porowatości wielowarstwowych kulistych cząstek koloidalnych

Projekt badawczy N N204 347737 [2009-2012]

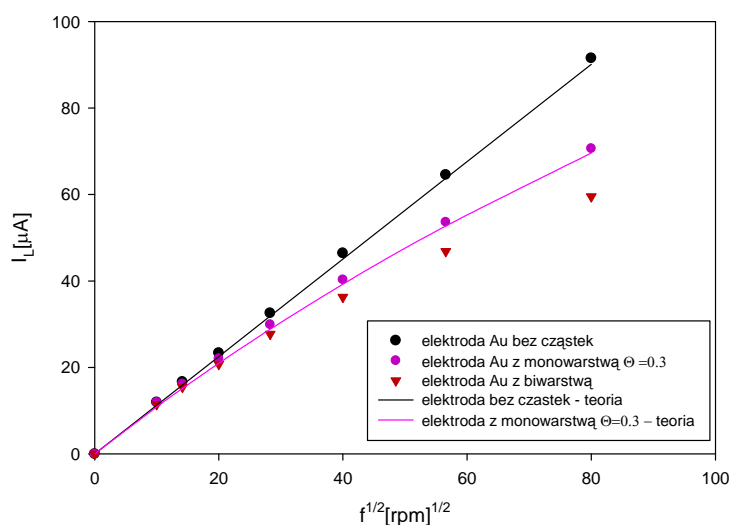
(kierownik projektu: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN)

Metodą dynamicznego rozpraszania światła wykonano pomiary wielkości i potencjału powierzchniowego kilku rodzajów cząstek lateksowych w funkcji pH i stężenia elektrolitu. Opracowano metodę mechanicznego polerowania i czyszczenia złotej elektrody dyskowej, pozwalającą na otrzymanie gładkiej i czystej powierzchni o powtarzalnych parametrach. Fizykochemiczne własności powierzchni elektrody scharakteryzowano ilościowo metodami mikroskopii optycznej, mikroskopii sił atomowych, metodami elektrochemicznymi, a także za pomocą pomiarów kinetyki adsorpcji naładowanych cząstek lateksowych. Przeprowadzono pomiary granicznego prądu dyfuzyjnego w układzie wirującej złotej elektrody dyskowej w 1 mM roztworze żelazicyjanku potasowego przy różnych prędkościach obrotowych. Wykonano również pomiary granicznego prądu dyfuzyjnego dla elektrody dyskowej pokrytej monowarstwą oraz biwarstwą cząstek koloidalnych o wielkości 1  $\mu\text{m}$ . Wykazano, że w zakresie średnich i dużych pokryć powierzchni mierzona wartość prądu granicznego jest zgodna z teorią Levicha i może być obliczona za pomocą równania:

$$I = \frac{I_L}{1 + 2a[1 + (\pi/8 - 1/3)\theta]/(\delta_d \varepsilon^2)}$$

W równaniu tym  $I_L = 0.62D^{2/3}\omega^{1/2}\nu^{-1/6}cSe$  jest prądem Levicha do niepokrytej powierzchni elektrody,  $D$  i  $c$  są odpowiednio współczynnikiem dyfuzji i stężeniem jonów żelazicyjanku,  $\omega$  i  $S$  są odpowiednio prędkością kątową i powierzchnią elektrody,  $\nu$  jest lepkością kinetyczną roztworu,  $e$  ładunkiem protonu,  $a$  promieniem cząstki koloidalnej,  $\theta = n\pi a^2/S$  jest pokryciem powierzchni elektrody,  $n$  liczbą zaadsorbowanych cząstek,  $\delta_d = 1.61D^{1/3}\omega^{-1/2}\nu^{1/6}$  jest grubością dyfuzyjnej warstwy granicznej, natomiast  $\varepsilon = 1 - 2\theta/3$  jest porowatością zaadsorbowanej warstwy.

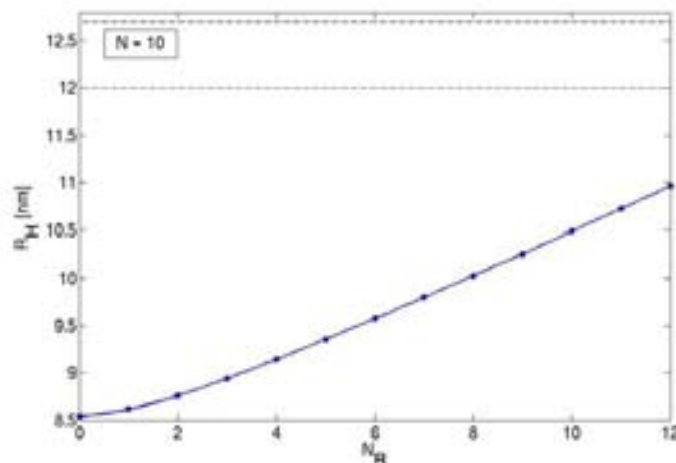
Na poniższym rysunku przedstawiono porównanie wyników eksperymentalnych i teoretycznych granicznego prądu dyfuzyjnego dla złotej elektrody dyskowej bez cząstek koloidalnych, a także z mono- i biwarstwą cząstek lateksowych.



### 13. Nowa metoda opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych

Projekt badawczy N N204 026438 [2010-2013]  
(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Znajomość tensorów ruchliwości hydrodynamicznej oraz lepkości wewnętrznej suspensji ma istotne znaczenie dla wyznaczenia konformacji cząsteczek białek w roztworach oraz na powierzchniach międzyfazowych, a także dla opisu kinetyki ich adsorpcji wyznaczanej często przez pomiar potencjału przepływu. Ze względu na skomplikowane kształty cząsteczek białek, bezpośrednie obliczenia teoretyczne tych parametrów są praktycznie niemożliwe. Tak więc, w ramach przeprowadzonych prac rozwinięto efektywne podejście oparte na koncepcji zastąpienia realnego kształtu cząsteczki białka układem stykających się kul o różnej wielkości. Taka transformacja kształtu cząsteczki umożliwia przeprowadzenie obliczeń tensorów ruchliwości, dyfuzji oraz lepkości wewnętrznej dla różnorodnych kształtów cząsteczek. Obliczenia te były prowadzone w oparciu o liniowe równanie Stokesa, opisujące pole przepływu cieczy. Na powierzchniach stałych zastosowano warunki brzegowe w postaci braku poślizgu, zakładając równocześnie, że objętość cieczy nie jest ograniczona. Stosując formalizm sił indukowanych oraz tensor Oseena, jako funkcję Greena dla tej geometrii przepływu, równanie Stokesa zostało przekształcone w układ równań całkowych na powierzchniach kul modelujących realny kształt cząsteczki białka. Równania te były następnie transformowane do układu multipolowych harmonik sferycznych. Warto podkreślić, że w przeciwieństwie do poprzednich podejść teoretycznych, obliczenia przeprowadzone przez nas uwzględniają sprzężenie między ruchem translacyjnym, a rotacyjnym cząsteczki białka. Sprzężenie to wywiera istotny wpływ na współczynnik oporu hydrodynamicznego cząsteczek białka. Jest on wyrażany często przez tzw. promień hydrodynamiczny  $R_H$ , który zawiera tym samym informację o uśrednionych rozmiarach cząsteczki. Zależność promienia hydrodynamicznego wyznaczona według powyższego schematu obliczeń dla fibrynogenu od długości ramion bocznych (zależnej od siły jonowej oraz pH roztworu), modelowanej jako ilości kul  $N_B$  pokazana jest na Rysunku 1.



Rys. 1. Zależność promienia hydrodynamicznego fibrynogenu  $R_H$  od długości bocznych łańcuchów cząsteczki, modelowanych ilością merów  $N_B$ .

Porównanie uzyskanych wyników teoretycznych z pomiarami doświadczalnymi prowadzonymi przy pomocy metody DLS wykazała, że stopień hydratacji cząsteczki fibrynogenu wynosi ok. 30 %.

## **14. Modelowanie teoretyczne kinetyki i równowagi procesów sorpcji jonów metali ciężkich na materiałach pochodzenia biologicznego**

Projekt badawczy N N204 291238 [2010-2012]  
(kierownik projektu; prof. Władysław Rudziński)

Wiązanie jonów metali ciężkich przez alginian wapnia opisywano za pomocą wielu różnych, konkurencyjnych modeli. Porównaliśmy dwa konkurencyjne, najbardziej podstawowe podejścia w celu systematycznego porównania ich zdolności do opisu równowagi procesu sorpcji w zależności od pH oraz stężenie jonów metalu w roztworze. Wybrano jedenaście układów eksperymentalnych zawierających alginian wapnia oraz dwuwartościowe jony miedzi, kadmu i ołowiu. Przedyskutowano zalety oraz ograniczenia obu modeli. Żaden z nich nie umożliwił w pełni zadowalającego opisu wszystkich serii danych; model wiązania dwucentrowego jest lepszy pod względem spójności otrzymanych parametrów (np. współczynników Donnana oraz stałych równowagi). Jakość dopasowań jest zbliżona w obu przypadkach.

Została także przeprowadzona analiza różnych modeli reprezentujących wpływ pH na równowagę biosorpcji jonów metali ciężkich. Wszystkie z badanych modeli prowadzą do jednakowych wyrażeń analitycznych (np. równań izoterm Langmuira lub Flory), gdy zaniedbać efekty związane z pH roztworu. Ponadto, nawet w przypadku uwzględnienia pH, część modeli (np. modele adsorpcji konkurencyjnej oraz wymiany jonowej) nadal daje identyczne wyrażenia matematyczne opisujące równowagę adsorpcyjną. Rzeczywisty mechanizm procesu może zostać zidentyfikowany na podstawie różnic pomiędzy wybranymi parametrami układu dla stanów początkowego i końcowego. Obserwacja ta została jakościowo i ilościowo opisana.

Wykonano również uzupełniające badania dotyczące modelowania molekularnego oddziaływań kwasu alginowego oraz alginianów z fenolem i jego wybranymi pochodnymi (*o*-chlorofenol, *p*-chlorofenol).

## 15. Biokatalityczna synteza chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenową - teoria i eksperyment

Projekt badawczy N N204 269038 [ 2010-2013]

(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

Przeprowadzono (zadanie 1) testy katalityczne dla 10 nowych substratów 4-etylorezorcynolu, 4-etylokatecholu, 2-, 3-, 4-propylofenolu, kwasu 4-etylobenzoowego, 3-etyloaniliny, 3-etylopirydyny, indanu i kumaranu. Dla 3-etyloaniliny, 4-etylorezorcynolu, 3-etylopirydyny, indanu oraz 2-,3-, 4-propylofenolu przeprowadzono pełną charakterystykę kinetyczną dopasowując do zależności aktywności od stężenia substratu model Michaelisa-Menten. Z pośród przebadanych związków wysoką aktywność enzymu zaobserwowano w przypadku 4-etylorezorcynolu (360% aktywności z etylobenzenem), kumaranem (80% aktywności), indanem (80% aktywności), 4-propylofenolem (40 % aktywności). Pozostałe związki wykazywały niską aktywność (3-etyloanilina 25%, 3-etylopirydyna 3.7 %, 3-propylofenol 3.14%, 2-propylofenol 6.3), były inhibitorami (kwas 4-etylobenzoowy) bądź ze względu na nie enzymatyczną reakcję z tetrafluoroboranem ferrocenu używanym jako akceptor elektronowy nie było możliwości oznaczenia ich aktywności (4-etylokatechol).

Uzyskane parametry kinetyczne posłużą do konstrukcji modelu przewidującego szybkość reakcji enzymatycznej, który powstanie w ramach realizacji zadania 3. Stereospecyficzność reakcji chemicznej katalizowanej przez EBDH przebadano metodami chiralnej chromatografii cieczowej detekcją DAD i MS (APCI). Przeprowadzono badania dla 3-etyloaniliny, indanu i kumaranu wykazując odpowiednio 100%, 100% i 95% stereoselektywność odpowiednio do izomeru S lub jednego izomerów.

Zgromadzono (zadanie 3) bazę danych substratów i inhibitorów EBDH, która liczyła 46 związków. Następnie wykonano obliczenia kwantowo-chemiczne (DFT, B3LYP, baza double-zeta) opisujące parametry badanych związków: cząstkowy ładunek na węglu alfa najwyższy i najniższy ładunek atomowy oraz różnica między nimi w analizie Mullikena i NBO, częstość symetrycznego rozciągania wiązania C-H, przesunięcie H-NMR aktywowanego atomu wodoru, przesunięcie C-NMR węgla alfa, energie spinorbitalu HOMO i LUMO oraz różnica energii między nimi. Wpływ podstawników na względną entalpię swobodną tworzenia formy rodnikowej i karbocationowej został oszacowany za pomocą osobnych obliczeń termodynamicznych. Zastosowano alternatywę dla eksperymentalnego parametru stałej Hammeta w postaci potencjału elektrostatycznego w jądrze. Parametry steryczne opisano za pomocą masy molowej, całkowitej energii, energii zerowej (ZPE) (parametry z obliczeń DFT) oraz powierzchni molekularnej, cząstkowej powierzchni polarnej i refrakcji molekularnej (parametry z Discovery Studio 2.5). Ponadto bazę uzupełniono parametrami opisującymi hydrofobowość ( $\log P$  and  $\log P_{MR}$ ) i wielkościami topologicznymi (indeksy molekularnych połączeń Kiera i Halla  $\chi^0, \chi^1, \chi^2$  indeksy Balbana Zagreba). Uzupełniono topologiczny opis o indeksy rozmieszczeń podstawników w pierścieniu aromatycznym względem utlenianego podstawnika alkilowego. Taki opis badanych związków posłużył do budowy modeli neuronowych przewidujących szybkość reakcji z EBDH.

Przeprowadzono (zadanie 2) modelowanie metodami QM:MM mechanizmu aktywacji etylobenzenu w całej podjednostce alfa EBDH. Zastosowane podejście uwzględniało mechaniczne (mechanical embedding) oddziaływanie białka z traktowanym kwantowo-mechanicznie centrum aktywnym. Uzyskany profil energetyczny wykazał analogiczny charakter aktywacji jak dla modeli klastrowych centrum w próżni (rodnikową aktywację C-H i przeniesienie drugiego elektronu w czasie powrotu OH). Wstępne próby zastosowania otoczenia elektrostatycznego białka (electronic embedding) wykazały istotny jego wpływ na stabilizację stanów przejściowych i transferu elektronowego.

## 16. Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami

Projekt badawczy N N204 269238 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Robert Socha)

Wiedza na temat manipulacji strukturami o wymiarach atomowych pozwala na uzyskanie nowych układów o specyficznych i dedykowanych właściwościach. Niskowymiarowe struktury tlenków manganu (II-VII) znalazły i znajdują coraz większe zainteresowanie ze względu na ich specyficzne właściwości morfologiczne, elektronowe oraz magnetyczne. Nieliczne próby otrzymywania epitaksjalnych tlenków manganu (głównie MnO oraz Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) podjęte w okresie ostatnich kilku lat powodują, że w tym obszarze nauki wciąż istnieje możliwość syntezy układów o ciekawych właściwościach, odmiennych od właściwości układów występujących w naturze czy też syntezowanych w formie zdyspergowanej i często wykazujących znacznie podwyższoną selektywność.

W ramach zadań projektu na 2010 rok podjęto opracowanie metodyki otrzymywania epitaksjalnych nanostruktur tlenku manganu (II,III) Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (spinel) oraz wymienionego tlenku podstawionego częściowo innym metalem na monokrystalicznym podłożu tlenkowym. Jako podłoże wybrano monokryształ MgO(001) otrzymywany w postaci łupanej lub polerowanej. W celu uzyskania warstwy tlenku zastosowano utlenianie uprzednio naniesionej warstwy metalu. Dyfrakcja elektronów niskiej energii (LEED) została użyta do weryfikacji otrzymanej struktury, a spektroskopia fotoelektronów generowanych promieniowaniem X (XPS/ESCA) oraz spektroskopia elektronów Augera (AES i XAES) do analizy składu i stanów elektronowych pierwiastków na otrzymanych powierzchniach.

Zastosowana procedura pozwoliła na uzyskanie epitaksjalnej warstwy metalicznego manganu na łupanym i polerowanym podłożu z MgO o orientacji (001). Utlenienie warstwy manganu w zakresie temperatur 150-250°C prowadziło do otrzymania warstwy tlenku manganu (III) Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub> o słabo wykształconej strukturze. Zastosowanie wygrzewania otrzymanej warstwy w temperaturze 400°C pozwoliło uzyskać warstwę epitaksjalną o orientacji (001).

Przeprowadzono próbę syntezy tlenku mieszanego zawierającego żelazo wbudowane w strukturę tlenku manganu. Na polerowane podłoże MgO(001) nałożono warstwę Mn a następnie warstwę Fe. Wygrzano otrzymany układ bimetaliczny do temperatury 400°C obserwując rozpuszczanie się Fe w Mn przy zachowaniu struktury podkładki. Po utlenieniu wygrzanej warstwy FeMn otrzymano mieszany układ tlenku manganu zawierający żelazo w formie utlenionej Fe<sup>2+</sup> i Fe<sup>3+</sup>. Struktura tlenku mieszanego po wygrzaniu w 400°C odpowiadała strukturze podkładki.

## 17. Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych SOFC pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro

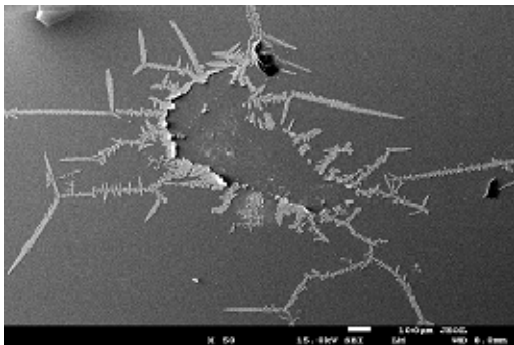
Projekt badawczy N N507 616638 [2010-2013]  
(kierownik projektu: dr Michał Mosiałek)

Stało-tlenkowe wysokotemperaturowe ogniwa paliwowe są perspektywnym źródłem energii elektrycznej. Sprawność zamiany energii chemicznej w elektryczną w ogniwach paliwowych jest wyższa niż w układach z tradycyjną turbiną parową. Obecnie technologia ta jest w fazie intensywnego rozwoju. W całym świecie pracuje wiele instalacji testowych (użytkownikami końcowymi są między innymi Google i Microsoft). Poważnymi problemami w konstrukcji ogniw paliwowych jest wysoki nadpotencjał reakcji redukcji tlenu oraz wysoka temperatura pracy ogniwa. Celem projektu jest otrzymanie i przetestowanie nowego typu materiałów katodowych zawierających srebro, które mogą lepiej katalizować reakcję redukcji tlenu oraz pracować w niższych temperaturach.

W roku 2010 był realizowany pierwszy etap projektu "Opracowanie metody wytwarzania elektrodowych materiałów kompozytowych zawierających srebro. Charakterystyka otrzymanych materiałów (skład fazowy, porowatość, mikrostruktura)". Wykonano syntezy materiałów katodowych  $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ -LSM,  $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ -SSC,  $\text{Gd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$  oraz materiałów elektrolitowych  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{1.9}$ -20SDC,  $\text{Gd}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{1.9}$ -20GDC, 8% mol  $\text{Y}_2\text{O}_3$  w  $\text{ZrO}_2$ -8-YSZ. Struktura otrzymanych związków została zbadana metodami XRD, SEM, EDS i XPS. Z materiałów tych zostały wytworzone nieporowate elektrolity w kształcie dysków. Wykonano syntezy materiałów elektrodowych  $\text{Gd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ -GSC, Struktura otrzymanych związków została zbadana metodami XRD, SEM, EDS i XPS. Przeprowadzono próbę wprowadzenia cząstek srebra do materiału katodowego  $\text{Gd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$  w początkowym etapie syntezy tlenku mieszanego.

Wykonano badania elektromigracji srebra w temperaturze 600°C, w układach Ag|YSZ, Ag|LSM pod wpływem przyłożonego potencjału ujemnego. Stwierdzono wzrost powierzchni kontaktu katoda|elektrolit w wyniku krystalizacji powierzchniowych dendrytów metalicznego srebra o grubości powyżej 1 mikrometra na powierzchni YSZ. Na podstawie pomiarów elektrochemicznych określono dynamikę tego procesu. Nie stwierdzono wzrostu powierzchni kontaktu na złączu Ag|LSM natomiast stwierdzono spadek zawartości manganu po stronie LSM.

Przeprowadzono pierwsze badania na elektrodach punktowych w układzie elektroda tlenkowa|elektrolit tlenkowy. Wykonano ogniwo w układzie LSM|YSZ i zmierzono widma impedancyjne tej elektrody w zależności od temperatury i polaryzacji elektrody. Pomiar wykazały, że w przeciwieństwie do metalicznych elektrod punktowych polaryzacja złącza w tym układzie nie zmienia trwale impedancji elektrody.



Rys. 1. Obraz SEM elektrolitu 8YSZ po 24 godzinach przy -0,5V w atmosferze powietrza w temperaturze 600°C

## **18. Nowe metody dyfraktometrii proszkowej w badaniach strukturalnych materiałów częściowo amorficznych, nieuporządkowanych oraz o obniżonej wymiarowości**

Projekt badawczy N N204 546439 [2010-2012]

(kierownik projektu: prof. Wiesław Łasocha)

Badania strukturalne przy użyciu nowoczesnych metod dyfraktometrii proszkowej, dla umiarkowanie złożonych preparatów, przy braku tekstury czy innych czynników zakłócających, są na ogół szybkie i niezawodne. Jednakże, dla wielu ważnych materiałów, otrzymujemy preparaty amorficzne lub w dużej części amorficzne, materiały o 1- lub 2- wymiarowym uporządkowaniu. Materiały te mogą być cennymi katalizatorami czy kompozytami o ciekawych własnościach fizycznych. Ich badania dyfrakcyjne są bardzo trudne z uwagi na bardzo złą jakość (i/lub ubogie w klasycznym sensie w informacje strukturalne) obrazy dyfrakcyjne.

W ramach projektu są prowadzone prace nad:

- zastosowaniem metody Pattersona oraz 'charge flipping' do badań 'niestandardowych' preparatów o obniżonej wymiarowości, w tym hybrydowych nieorganiczno - organicznych materiałów warstwowych.
- W dalszych etapach planujemy badania strukturalne prowadzone w oparciu o formalizm PDF (pair distribution function). Ich celem będzie nie tylko stawianie hipotez odnośnie budowy elementów strukturalnych, ale też ilościowa weryfikacja utworzonych modeli, poprzez ich udokładnianie w sposób podobny do metody Rietvelda.
- Przewidujemy niezależną weryfikację modeli struktur poprzez metody nie-dyfrakcyjne. Wsparcie metod obliczeniowych, np. metodą DFT (Density Functional Theory) może być decydujące dla poprawnego dopracowania modelu struktury.
- Testowana będzie możliwość zastosowania zjawiska różnicowej absorpcji promieniowania X w detekcji i opisie tekstur preparatu. Badania takie będą prowadzone pod kątem rozdzielania intensywności nakładających się linii i dalszych badań strukturalnych.

Celem projektu jest więc dostosowanie i uzupełnienie istniejących procedur pomiarowych i obliczeniowych o istotne elementy (Lampa Ag z wyposażeniem, algorytmy obliczeniowe CHARGE FLIPPING, PDF czy DFT) pozwalające na szersze zastosowanie metod dyfraktometrii proszkowej do charakterystyki strukturalnej nowych materiałów wykazujących duży stopień nieuporządkowania, obecność faz nanometrycznych lub częściowo amorficznych, w oparciu o laboratoryjne źródła promieniowania.

## 19. Stabilność, funkcjonalność i mechanizm tworzenia wielowarstwowych struktur polimerowo-kazeinowych

Projekt badawczy N N204 546639 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Kazeina należy do białek wewnętrznie nieustrukturyzowanych, które w stanie naturalnym nie wykazują struktury trzecio- i czwartorzędowej, a mimo to są biologicznie aktywne. Białka tego typu pełnią w żywych organizmach bardzo ważne role, dlatego też są obiektem zainteresowania wielu naukowców. Jednakże pomimo wielu badań prowadzonych w ostatnich latach ich funkcje nie są do końca poznane, a wiedza na temat samoorganizacji i adsorpcji tych protein jest raczej ograniczona. Kazeina w środowisku wodnym jest powierzchniowo aktywna i tworzy w nim micelarne agregaty. Z drugiej strony pojedyncze molekuly białka zachowują się jak polielektrolity i dzięki temu mogą z łatwością być wbudowane w wielowarstwowe filmy polielektrolitowe. Główną cechą biologiczną kazeiny jest jej zdolność do wiązania jonów wapnia i fosforu. Dlatego też materiały pokryte filmami polielektrolitowo-kazeinowymi mogą znaleźć potencjalne zastosowania w medycynie lub przemyśle mleczarskim.

W przedstawionym projekcie badano tworzenie wielowarstwowych filmów polimerowo-kazeinowych zawierających  $\alpha$ - lub  $\beta$ -kazeinę. Ponieważ w neutralnym środowisku pH kazeina wykazuje ujemny ładunek, w tworzeniu filmów polimerowo-kazeinowych służy jako polianion, a jako polikation jest używana poli-L-lizyna (PLL). Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe budowane są z wykorzystaniem sekwencyjnej adsorpcji warstw polielektrolitowych (lbl - layer by layer) na podkładkach krzemowych Si/SiO<sub>2</sub> oraz na kryształach kwarcowych pokrytych złotem (QCM). Grubości filmów mierzono za pomocą elipsometrii i QCM. Badano zależność grubości filmów od siły jonowej roztworów, z których nakładane były warstwy oraz zachowanie się tych filmów w przypadku działania na nie roztworami o różnych wartościach pH. W wyniku przeprowadzonych badań zauważono, że optymalne warunki dla tworzenia filmów polimerowo-kazeinowych występują przy sile jonowej  $I=0.15$  M NaCl (najgrubsze filmy). Filmy nie były odporne na roztwory o pH 2, gdyż w tych warunkach ładunek kazeiny przechodził w dodatni, oraz na roztwory o pH 11 z powodu neutralizacji PLL. W punkcie izoelektrycznym kazeiny (pH 4.5) tylko filmy z  $\alpha$ -kazeiną były stabilne. W warunkach naturalnych filmy zawierające  $\alpha$ -kazeinę także były bardziej stabilne niż te zawierające  $\beta$ -kazeinę, kiedy kontaktowane je z roztworami o różnych wartościach pH.





## **PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE**



# 1. Osadzanie modelowych mikrokapsulek na powierzchniach metalicznych modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitów

Projekt badawczy promotorski N N204 2145 33 [2007-2010]

(promotor: prof. Piotr Warszński; doktorant: mgr Anna Trybała)

W ramach założonych zadań wynikających z planu na rok 2010 wykonane zostały następujące prace:

- preparatyka mikrokapsulek na rdzeniu fluoresceinowym z płaszczem zbudowanym z polielektrolitów modelowych i naturalnych, metodą Layer-by-Layer
- badanie przepuszczalności powłok mikrokapsulek

Przygotowane zostały kapsułki zbudowane z rdzenia fluoresceinowego (kryształy o rozmiarach 4-9 $\mu$ m) oraz powłoki składającej się z polielektrolitów modelowych: polikationu PAH - polialliloamina i polianionu PSS - polisulfonian styrenowy lub polielektrolitów naturalnych: polikationu CHIT - chitosan i polianionu ALG - alginina. Liczba warstw w powłoce wynosiła od 1 do 50.

Mikrokapsułki zostały przygotowane w roztworze o pH=4, przy którym rdzeń fluoresceinowy pozostaje nierozpuszczalny, pomiar intensywności fluorescencji następował w momencie zmiany pH środowiska (bufor fosforanowy o pH=8) powodującej rozpuszczanie rdzenia. Spektrofluorometrycznie monitorowano zmianę intensywności fluorescencji barwnika w roztworze, uwolnionego z wnętrza kapsulek w czasie. Podczas uwalniania barwnika z kapsułki intensywność fluorescencji wzrasta, aż do rozpuszczenia całego rdzenia.

Szybkość rozpuszczania barwnika w trakcie uwalniania z kapsułki została porównana z rozpuszczaniem kryształu fluoresceiny nieopłaszczanego polielektrolitami. Wyniki przepuszczalności powłok kapsulek zostały znormalizowane do stężenia kapsulek.

Z przeprowadzonych badań dla mikrokapsulek z powłoką (PAH/PSS)<sub>n</sub> stwierdzono, że uwalnianie barwnika z kapsułki opłaszczanej filmem 50-cio warstwowym jest ok. 30-krotnie wolniejsze w stosunku do rozpuszczania czystego barwnika.

Określając wpływ pierwszej warstwy PEI na przepuszczalność powłoki stwierdzono, że czas potrzebny do uwolnienia fluoresceiny z kapsułki z powłoką 50-cio warstwową o strukturze (PAH/PSS)<sub>25</sub> wynosi ok. 360s, natomiast z kapsułki z płaszczem PEI(PSS/PSH)<sub>24</sub>PSS ok. 3320s. Oznacza to, że kapsułki zawierające w płaszczu pierwszą warstwę PEI spowalniają uwalnianie barwnika ok. 9 razy bardziej niż kapsułki bez PEI o tej samej liczbie warstw. Z przeprowadzonych badań wynika, że niezależnie od ilości warstw w płaszczu kapsułki użycie PEI powoduje, że powłoka jest mniej przepuszczalna.

Dla kapsulek z powłoką z polielektrolitów naturalnych stwierdzono, że uwalnianie fluoresceiny z kapsulek opłaszczonych filmem CHIT/ALG jest bardzo szybkie, fluoresceina zamknięta w kapsułce opłaszczonej 50 warstwami CHIT/ALG rozpuszcza się i uwalnia całkowicie z kapsułki w ciągu ok. 40s, a to oznacza, że film o strukturze (CHIT/ALG)<sub>25</sub> spowalnia uwalnianie fluoresceiny z kapsułki tylko 4 razy w stosunku do rozpuszczania czystej fluoresceiny. Kapsułki z powłoką zawierająca PEI jako pierwszą warstwę spowalniają uwalnianie fluoresceiny dużo bardziej. Fluoresceina z kapsułki opłaszczonej filmem PEI(ALG/CHIT)<sub>24</sub>ALG uwalnia się ok. 40 razy wolniej niż z kapsułki opłaszczonej filmem (CHIT/ALG)<sub>25</sub>. Oznacza to, że użycie PEI do budowy filmów z polielektrolitów naturalnych czyni warstwy dużo mniej przepuszczalnymi. Efekt użycia PEI jako pierwszej warstwy polegający na zmniejszeniu przepuszczalności filmu jest dużo większy dla multiwarstw zbudowanych z polielektrolitów naturalnych w porównaniu do filmów z polielektrolitów modelowych.

## 2. Wpływ modyfikacji gęstości elektronowej centrum aktywnego katalizatora na jego aktywność w procesie utleniania węglowodorów.

Projekt badawczy promotorski N N205 018934 [2008-2010]

(promotor: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, doktorant: mgr inż. Robert Karcz)

Heteropolikwasy są szeroką grupą związków chemicznych, spośród których najważniejszymi dla katalizy są te o strukturze anionu Keggina. Anion Keggina składa się z centralnego tetraedru zawierającego heteroatom (Al, Si, P) otoczonego dwunastoma oktaedrami tlen-metal addenda (W, Mo). Heteropolikwasy posiadają użyteczne dla katalizy właściwości takie jak wysoka kwasowość oraz zdolność do uczestniczenia w reakcjach redoks. Te właściwości mogą być modyfikowane poprzez zmianę składu anionu Keggina, co pozwala na otrzymanie wyspecjalizowanego katalizatora aktywnego już w łagodnych warunkach.

Kwasy fosforowowolframowy i fosforowomolibdenowy zostały zmodyfikowane poprzez wymianę kationów kompensujących i wprowadzenie kationów metalu przejściowego w tzw. pozycje lakunarne. Aniony lakunarne tworzą się wskutek usunięcia jednego ugrupowania tlen-metal addenda z anionu Keggina i utworzenie wolnego miejsca w strukturze anionu. Aniony lakunarne mogą związać w swojej strukturze metal przejściowy. Tak zmodyfikowane heteropolikwasy, ze względu na sposób koordynacji metalu przejściowego, zdolności do oddawania elektronów, możliwości wpływu na potencjał redoks poprzez używanie różnych atomów addenda oraz występowanie dobrze zdefiniowanych centrów aktywnych, wykazują podobieństwo do metaloporfiryn. W celu zwiększenia rozpuszczalności anionów lakunarnych w rozpuszczalnikach organicznych użyto czynnika przejścia fazowego – bromku tetrabutylamoniumowego. Otrzymano sole organiczne lakunarnych heteropolikwasów zawierające mangan, żelazo, kobalt lub miedź.

Otrzymane katalizatory zawierające aniony lakunarne zostały scharakteryzowane przy pomocy metod XRD, DSC-TG, spektroskopii UV-Vis i FTIR. Metody te potwierdziły wprowadzenie metalu przejściowego do struktury heteropolikwasu.

Otrzymane sole zastosowano jako katalizatory reakcji utleniania cyklooktanu do cyklooktanolu i cyklooktanonu.

Tabela 1. Wydajność do cyklooktanolu i cyklooktanonu w reakcji utleniania cyklooktanu powietrzem w obecności soli tetrabutylamoniumowych heteropolikwasów zawierających jony metalu przejściowych.

Katalizator	Cyklooktanol	Cyklooktanon	$\Sigma$ C-ol + C-on
TBAPMoCo	7,0	1,7	8,7
TBAPWCo	6,8	0,7	7,5
TBAPWMn	5,5	1,1	6,6
TBAPWFe	4,0	1,2	5,2
TBAPWCu	3,6	0,8	4,4

Sól kobaltowa anionu lakunarnego TBAPWCo wykazuje najwyższą aktywność, natomiast sól miedziowa TBAPWCu najniższą aktywność w badanej reakcji. Wyższą wydajność do cyklooktanonu zaobserwowano dla soli kobaltowej kwasu fosforowolframowego, będącego silnym kwasem, niż dla soli kobaltowej kwasu fosforowomolibdenowego, charakteryzującego się dobrymi właściwościami redoksywnymi. Aktywność katalityczna otrzymanych soli jest zależna od rodzaju metalu przejściowego wprowadzonego do anionu Keggina.

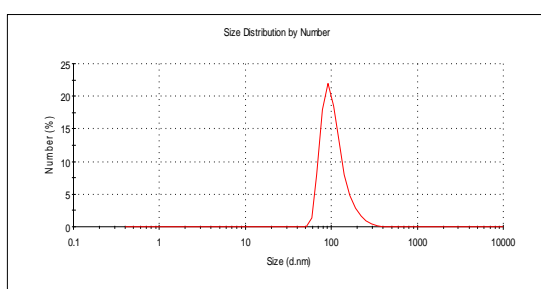
### 3. Enkapsulacja substancji aktywnych w rdzeniach emulsyjnych

Projekt badawczy promotorski N N204 255934 [2008-2010]

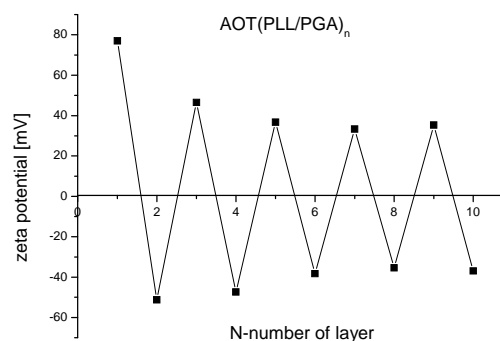
(promotor: prof. Piotr Warszński, doktorant: mgr Krzysztof Szczepanowicz)

Sekwencyjna adsorpcja polielektrolitów jest standardową metodą otrzymywania mikrokapsulek na rdzeniach koloidalnych. Cząstki stałe (krzemionka,  $\text{CaCO}_3$ ) zawierające czynnik aktywny są najczęściej używane jako rdzenie do produkcji mikrokapsulek. Cząstki te mogą być rozpuszczone w celu otrzymania pustej kapsułki, a następnie taką pustą kapsułkę można napęczyć czynnikiem aktywnym. Wadą takiej metody jest niska skuteczność ładowania czynnika aktywnego do pustej kapsułki oraz fakt, że zniszczony rdzeń często pozostaje uwieczony w kapsułce. Użycie kropli emulsyjnej jako rdzenia do produkcji kapsulek daje możliwość zamknięcia olejo-rozpuszczalnych czynników aktywnych w kapsułkach o kontrolowanej wielkości oraz pożądanych właściwościach powłoki.

W 2010 roku skupiono się na preparatyce kapsulek polielektrolitowych, zawierających modelowe leki (Witamina A oraz beta-karoten), bazujących na kroplach emulsyjnych. Powłoki polielektrolitowe na kroplach emulsji zostały zbudowane przez sekwencyjną adsorpcję polielektrolitów, metodą nasyceniową. Otrzymano kapsułki o średnim rozmiarze kropeł 60-100nm (Rysunek 1). Typowy wykres zależności potencjału zeta otrzymanych kapsulek od ilości warstw dla biokompatybilnych polielektrolitów PLL i PGA przedstawia Rysunek 2.



Rys. 1. Rozkład wielkości kapsulek AOT(PLL/PGA)



Rys. 2. Zależność potencjału zeta otrzymanych kapsulek od ilości warstw polielektrolitu

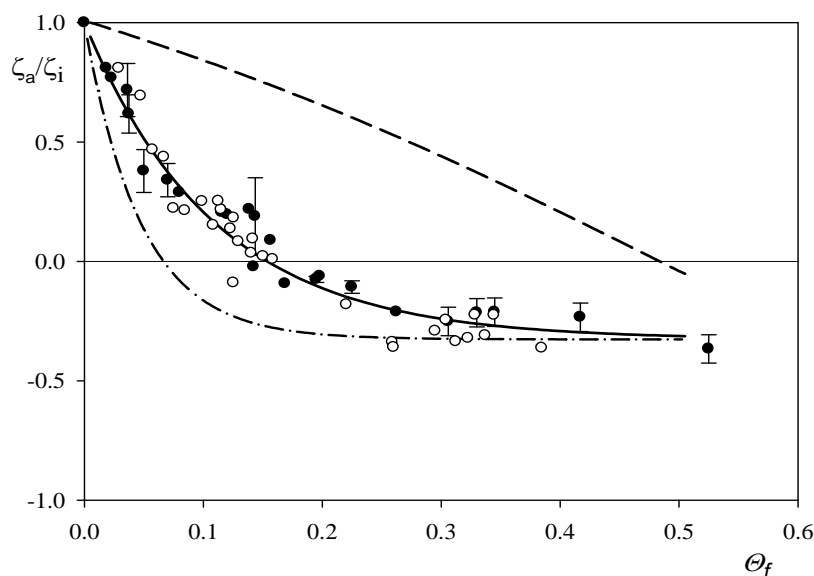
Biomedyczne zastosowanie nanokapsulek wymaga doboru biokompatybilnych polielektrolitów i odpowiedniej modyfikacji powłok kapsulek. Tworzenie PEG korony na powierzchni kapsulek jest jedną z możliwych dróg eliminacji niespecyficznego wiązania białek do powierzchni kapsułki (opsonizacji) oraz dalszej eliminacji kapsulek z organizmu. Został zsyntezowany kopolimer PGA-g-PEG, który został użyty do tworzenia zewnętrznej otoczki na kapsułkach AOT(PLL/PGA)<sub>n</sub>.

#### 4. Określenie konformacji wybranych białek w roztworach wodnych oraz na powierzchniach międzyfazowych o kontrolowanym stopniu heterogeniczności

Projekt badawczy promotorski N 204 166336 [2009-2011]

(promotor: prof. Zbigniew Adamczyk, doktorant: mgr Monika Wasilewska)

W ramach określenia konformacji białek na powierzchniach międzyfazowych, przeprowadzono pomiary potencjału przepływu warstewek fibrynogenu na powierzchni miki. Na tej podstawie obliczono potencjał zeta powierzchni, posiadający jednoznaczny związek z pokryciem powierzchniowym białka. Na Rysunku 1 przedstawiono wyniki tych pomiarów, przeprowadzonych dla  $\text{pH}=3.5$  oraz siły jonowej  $10^{-2}$  M NaCl. Uzyskane wyniki doświadczalne, pokazujące zależność znormalizowanego potencjału zeta powierzchni od pokrycia fibrynogenu  $\Theta_f$  porównywano z wynikami teoretycznymi obliczonymi na podstawie różnych modeli adsorpcji, m.in. modelu Gouya-Chapmana (linia przerywana na Rysunku 1). Jak widać, model ten jest nieadekwatny, w przeciwieństwie do rozwiniętego przez nas modelu (linia ciągła na Rysunku 1), który postuluje płaską adsorpcję cząsteczek fibrynogenu na powierzchni miki. Z kolei, wyniki teoretyczne obliczone na podstawie modelu przewidującego nieorientowaną adsorpcję fibrynogenu (linia przerywana-kropkowana) również nie opisują poprawnie uzyskanych danych doświadczalnych. Warto podkreślić, że wyniki dla fibrynogenu pozostają w dobrej zgodności z modelowymi wynikami uzyskanymi dla monodispersyjnych lateksów polistyrenowych (punkty niewypełnione na Rysunku 1). Wyniki przedstawione na Rysunku 1 jednoznacznie wskazują, że adsorpcja fibrynogenu na powierzchni mik przebiega w orientacji płaskiej i monowarstwowej.



Rys. 1. Zależność znormalizowanego potencjału zeta miki  $\xi_a/\xi_i$  od pokrycia fibrynogenem,  $\Theta_f$ . Punkty pełne (●) oznaczają wyniki eksperymentalne uzyskane metodą potencjału przepływu dla  $\text{pH}=3.5$ ,  $T=293$  K,  $I=10^{-2}$  M,  $\zeta_p/\zeta_i=-0.46$ , punkty niewypełnione (○) oznaczają wyniki uzyskane dla cząstek lateksu A500. Linia przerywana przedstawia wyniki teoretyczne obliczone z modelu Gouya-Chapmana dla powierzchni homogenicznej, linia ciągła oznacza wyniki teoretyczne obliczone z modelu trójwymiarowego, rozwiniętego w tej pracy, przy założeniu płaskiej adsorpcji cząsteczek fibrynogenu, linia kreskowano-kropkowana przedstawia wyniki obliczone przy założeniu adsorpcji nieorientowanej.

## 5. Właściwości fizykochemiczne i aktywność katalizatorów hybrydowych do jednoetapowej syntezy eteru dwumetylowego syntezowego z gazu syntezowego

Projekt badawczy promotorski -N N204 279937 [2009-2011]

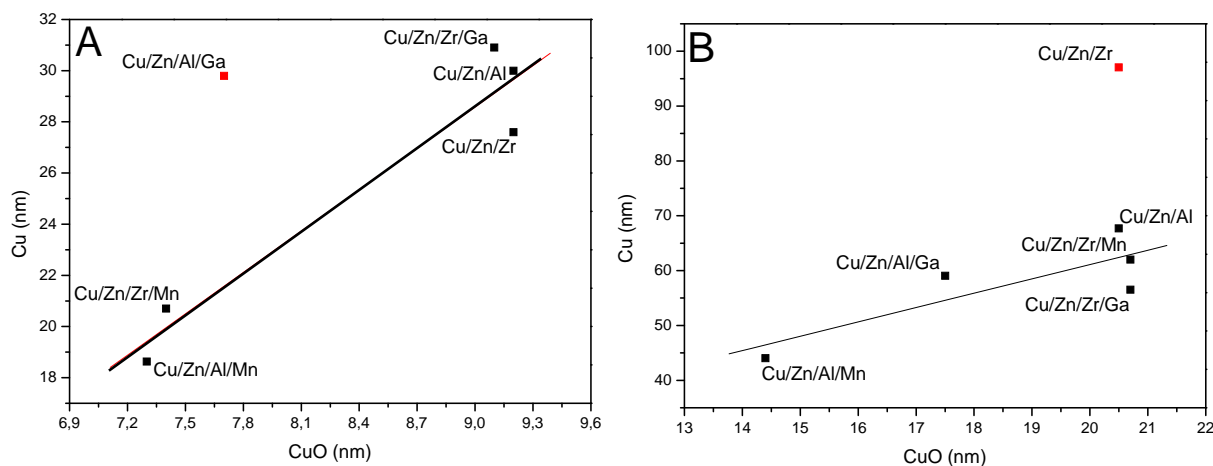
(promotor: dr hab. Ryszard Grabowski prof. IKiFP PAN, doktorant: mgr Michał Śliwa)

Katalizatory typu mieszanych tlenków, zawierające Cu, Al, Zr, Zn, Ga, Mn zostały otrzymane metodą współstrącania oraz cytrynianową. Katalizatory te scharakteryzowano przy użyciu następujących technik pomiarowych: TPR, SEM/EDS, ICP-OES i użyto je jako składową metaliczną katalizatora hybrydowego do syntezy eteru dwumetylowego z gazu syntezowego (STD process). Jako składową kwasową katalizatora hybrydowego wykorzystano komercyjny montmorylonit K10. Oba składniki mieszano w stosunku objętościowym 2:1.

Na podstawie analizy ICP-OES stwierdzono, że otrzymany skład katalizatorów jest zgodny ze składem nominalnym.

Badania termoprogramowalnej redukcji wodorem (TPR) wykazały obecność jednego pików redukcyjnego o ostrym kształcie, zarówno w przypadku katalizatorów otrzymanych metodą współstrącania, jak i cytrynianową. Widoczny na wszystkich profilach redukcyjnych pik związany jest z redukcją obecnej w katalizatorze miedzi  $\text{Cu}^{2+}$  do miedzi metalicznej ( $\text{Cu}^0$ ). Niższa temperatura redukcji w przypadku próbek otrzymanych metodą współstrącania związana jest z mniejszymi rozmiarami krystalitów CuO oraz wyższą dyspersją Cu w porównaniu do próbek otrzymanych metodą cytrynianową. Stwierdzono także, że wprowadzenie cyrkonu zamiast glinu poprawia redukowalność katalizatorów metalicznych.

Wyniki otrzymane metodami XRD, TPR oraz rozkładu  $\text{N}_2\text{O}$  jednoznacznie wskazują na istnienie proporcjonalności pomiędzy rozmiarem krystalitów CuO w katalizatorach przed redukcją oraz rozmiarem cząstek Cu w katalizatorach po redukcji (Rysunek 1).



Rys. 1. Zależność pomiędzy rozmiarami krystalitów CuO i Cu  
A - metoda współstrącania, B - metoda cytrynianowa

Analiza SEM/EDS potwierdziła, wyższe stężenie miedzi powierzchniowej w przypadku próbek o wyższej dyspersji Cu.

Wszystkie badane katalizatory hybrydowe są aktywne w procesie STD i wykazują maksimum aktywności w zakresie temperatur 290-300°C. Katalizatory hybrydowe zawierające w swoim składzie cyrkon zamiast glinu charakteryzują się wyższymi wydajnościami do eteru dwumetylowego. Obserwowany wzrost wydajności wynika z łatwiejszej redukcji CuO w tych katalizatorach. Najwyższą aktywność uzyskano dla katalizatorów hybrydowych o składzie Cu, Zn, Zr, Mn ( $Y_{\text{dme}}=45\%$ ) oraz Cu, Zn, Zr, ( $Y_{\text{dme}}=35\%$ ), które otrzymano odpowiednio metodą współstrącania oraz cytrynianową.

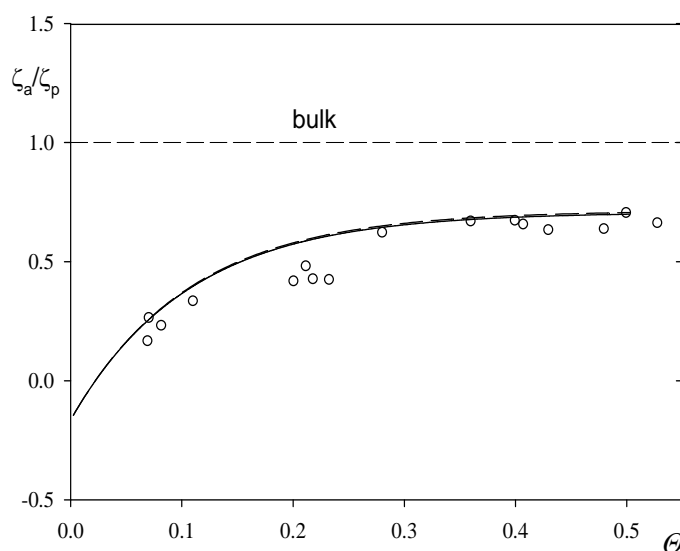


## 6. Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek i wybranych białek na powierzchniach granicznych wyznaczone przy pomocy badań elektrokinetycznych oraz mikroskopii AFM

projekt badawczy promotorski N N204 137537 [2009-2012]

(promotor: prof. Zbigniew Adamczyk, doktorant: Maria Zaucha)

Prace prowadzone w ramach niniejszego projektu miały na celu określenie granic stosowalności modelu teoretycznego, umożliwiającego obliczenie potencjału przepływu dla powierzchni pokrytych nanocząstkami koloidalnymi, polimerami i białkami. Ma to istotne znaczenie poznawcze i aplikacyjne, umożliwiając opracowanie precyzyjnej metody detekcji białek w roztworach na poziomie znacznie poniżej 1 ppm. Pierwszym etapem prowadzonych prac było przeprowadzenie pomiarów doświadczalnych dla modelowych suspensji koloidalnych: lateksów polistyrenowych o kontrolowanym ładunku powierzchniowym i rozmiarach cząstek. Wyniki tych pomiarów zostaną zastosowane jako układy referencyjne dla badań prowadzonych dla układów białkowych, w szczególności dla określenia oddziaływań w układzie antyciało/antygen. Na Rysunku 1 przedstawiono są wyniki uzyskane przy pomocy metody potencjału przepływu dla suspensji dodatniego lateksu A500 o rozmiarach cząstek 520 nm. Jak można zauważyć, znormalizowany potencjał zeta powierzchni miki, wyznaczony na podstawie tych pomiarów, wzrasta gwałtownie ze stopniem pokrycia lateksu. Następnie osiąga dla dużych pokryć wartość graniczną równą 0.71. Warto podkreślić, że, w przeciwieństwie do przewidywań intuicyjnych, wartość ta jest znacznie mniejsza, niż wartość potencjału zeta dla cząstek mierzona w głębi suspensji przy pomocy metody elektroforetycznej. Ponadto, uzyskane przez nas dane doświadczalne pozostają w dobrej zgodności z wynikami teoretycznymi, obliczonymi na podstawie modelu trójwymiarowej adsorpcji (linia ciągła na Rysunku 1).



Rys.1. Zależność znormalizowanego potencjału zeta miki  $\zeta_a/\zeta_p$  od stopnia pokrycia powierzchni cząstkami lateksu polistyrenowego o dodatnim ładunku powierzchniowym (A800). Punkty przedstawiają wyniki doświadczalne uzyskane przy pomocy metody potencjału przepływu, natomiast linia ciągła oznacza wyniki teoretyczne obliczone przy zastosowaniu naszego modelu adsorpcji trójwymiarowej. Linia przerywana przedstawia wartość graniczną potencjału zeta dla cząstek lateksu zmierzoną w głębi roztworu przy pomocy metody elektroforetycznej.

## **7. Wpływ surfaktantów kationowych i pH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości**

projekt badawczy promotorski N N204 179439 [2010-2012]

(promotor: prof. Kazimierz Małyś, doktorant: mgr inż. Anna Niecikowska)

Celem projektu jest określenie wpływu surfaktantów kationowych i pH środowiska na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe na powierzchniach o niskiej hydrofobowości w warunkach dynamicznych. Kontakt trójfazowy gaz/ciecz/ciało stałe powstaje, jeżeli film ciekły zostaje przzerwany w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego. Stabilność filmów zwilżających jest determinowana przez szereg czynników, z których najistotniejszymi są właściwości hydrofilowo/hydrofobowe powierzchni ciała stałego, szorstkość powierzchni, obecność substancji powierzchniowo aktywnych zaadsorbowanych na granicach międzyfazowych filmu (ich rodzaj i stężenie), oraz stan elektryczny obu powierzchni międzyfazowych. Oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy powierzchniami międzyfazowymi ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe mogą stabilizować lub destabilizować film zwilżający na powierzchniach o niskiej hydrofobowości, a właściwości elektryczne powierzchni roztwór/gaz roztwór/ciało stałe mogą być modyfikowane poprzez adsorpcję substancji powierzchniowo aktywnych oraz pH środowiska.

Rozpoczęto badania mające na celu określenie wpływu adsorpcji kationowych surfaktantów na przebieg kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego i kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego. Wyboru ciała stałego dokonano na podstawie danych literaturowych, biorąc pod uwagę dobre zdefiniowanie pod względem powierzchniowego ładunku elektrycznego. Wybrano mikię, której powierzchnia jest całkowicie zwilżalna przez wodę, a ponadto wykazuje ładunek ujemny praktycznie w całym zakresie pH. W dotychczas przeprowadzonych pomiarach modyfikowano ładunek powierzchni międzyfazowych ciecz/gaz (powierzchnia pęcherzyka) poprzez adsorpcję kationowych surfaktantów; bromków n-dodecylo- oraz n-cetyloamonowych (DDTABr i CTABr). Eksperymenty przeprowadzono równolegle dla dwóch różnych dystansów, jakie pokonuje pęcherzyk pomiędzy kapilarą, gdzie jest generowany, a powierzchnią ciała stałego: 10 mm i 100 mm, co pozwoliło lepiej przyjrzeć się architekturze warstwy adsorpcyjnej. Na powierzchni unoszącego się w roztworze pęcherzyka wyidukowana zostaje dynamiczna architektura warstwy adsorpcyjnej (DAL), czyli nierównomierne rozłożenie zaadsorbowanych cząsteczek po powierzchni pęcherzyka. Wyidukowanie DAL oznacza, że na górnym biegunie wpływającego pęcherzyka znajduje się minimalna ilość zaadsorbowanych molekuł substancji powierzchniowo aktywnych, a na dolnym biegunie ich stężenie jest znacznie wyższe od równowagowego. Przy czym procesy adsorpcji i desorpcji surfaktantów następują równolegle i w sposób ciągły w trakcie ruchu i kolizji pęcherzyka. Stan warstwy adsorpcyjnej i jej dynamiczna struktura wpływają w znaczący sposób na prędkość pęcherzyka, a ponadto mogą być jednym z istotnych czynników warunkujących kinetykę i czas tworzenia się kontaktu trójfazowego, ponieważ górny biegun wpływającego pęcherzyka tworzy dolną powierzchnię międzyfazową filmu ciekłego powstającego w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego.

Na podstawie dotychczas wykonanych pomiarów można stwierdzić, że wraz ze zmniejszeniem stężenia DDTABr i CTABr w roztworze coraz większą rolę zaczyna odgrywać stan dynamicznej warstwy adsorpcyjnej oraz kinetyka dyfuzji, ponieważ stwierdzono wydłużenie czasu powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni miki umiejscowionej daleko od kapilary, na której wytwarzano pęcherzyki.



## **PROJEKTY BADAWCZE ZAMAWIANE**



# 1. Chemia perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla

## Wielofunkcyjne katalizatory na osnowie minerałów warstwowych do jednoetapowego procesu: gaz syntezowy → metanol → eter dimetylowy

Projekt badawczy zamawiany PBZ-MEiN-2/2/2006 [2006-2010]  
(kierownik tematu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

W roku 2010 zakończono realizację projektu poświęconego syntezie i optymalizacji nowej generacji bifunkcyjnych katalizatorów, przeznaczonych do bezpośredniej konwersji gazu syntezowego do eteru dimetylowego (DME), poprzez metanol jako produkt pośredni (proces STD: syngas-to-dimethylether). Katalizator do syntezy metanolu z gazu syntezowego otrzymywano z prekursorów typu hydrotalkitu, a do odwodnienia metanolu do DME stosowano katalizatory otrzymane przez modyfikację montmorillonitu. Katalizator hybrydowy otrzymywano przez mechaniczne wymieszanie zgranulowanej składowej redoksowej i kwasowej. Mieszaninę reakcyjną stanowił gaz syntezowy o składzie  $H_2:CO:CO_2=65:30:5$ , reakcję prowadzono pod ciśnieniem 40 bar, w zakresie temperatur 250-290°C, przy  $GHSV=3600\text{ h}^{-1}$ . Badania przeprowadzone w ramach projektu pozwoliły na:

- zidentyfikowanie głównych czynników decydujących o aktywności katalitycznej w syntezie metanolu z gazu syntezowego układów otrzymanych z prekursorów hydrotalkitowych, zawierających jako główne metale strukturotwórcze Cu, Zn i Al. W szczególności stwierdzono, że głównym warunkiem uzyskania dobrej dyspersji fazy metalicznej miedzi, konieczne jest otrzymanie prekursora hydrotalkitowego o możliwie wysokiej krystaliczności.
- uzyskanie katalizatorów kwasowych aktywnych w odwodnieniu metanolu do DME na bazie naturalnego minerału montmorillonitu,
- wyselekcjonowanie układów katalitycznych pochodzenia hydrotalkitowego najbardziej aktywnych i selektywnych w syntezie metanolu oraz układów krzemianowych najbardziej aktywnych i selektywnych w reakcji odwodnienia metanolu, jako potencjalnych składowych katalizatora hybrydowego do procesu STD i optymalizację składu tego katalizatora. Stwierdzono, że najlepsze parametry procesu STD zapewniają katalizatory hybrydowe, w których składowa redoksowa CuZnAl była otrzymana z prekursora hydrotalkitowego metodą współstrącania przy  $pH=7$ , bez starzenia, natomiast składową kwasową stanowił i) czysty montmorillonit K10, lub ii) montmorillonit K10, na który została naniesiona 1 monowarstwa heteropolikwasu  $H_3PW_{12}O_{40}$ .

W kontekście danych literaturowych katalizatory opracowane w IKiFP PAN plasują się wśród tych, które odnotowują najwyższe wydajności DME.

## 2. Badania właściwości fizykochemicznych warstw pasywnych na stopach aluminium, magnezu i tytanu oraz powłok stopowych Zn-Ni, Zn-Co, Sn-Zn, Co-P i Ni-P na stalach

Projekt badawczy zamawiany PBZ-MNiSW-01/I/2007 [2008-2010]

(kierownik tematu: dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN)

Tytan i jego stopy są materiałami o wysokiej odporności na korozję i bardzo dobrych własnościach mechanicznych. Znajdują w związku z tym szerokie zastosowanie zarówno w lotnictwie, jako materiał konstrukcyjny, jak i w medycynie, jako materiał na implanty (ze względu na biokompatybilność). W literaturze szeroko są opisywane badania korozji tytanu i jego stopów w roztworach imitujących płyny fizjologiczne w temperaturze 37°C. Z punktu widzenia przemysłu lotniczego interesująca jest odporność na korozję w znacznie bardziej agresywnych środowiskach, na które narażone są części maszyn (solanka obecna na lotniskach w okresie zimowym). Adekwatnym odpowiednikiem takiego środowiska korozyjnego jest 5 % roztwór NaCl. Drugim metalem, którego stopy mają szerokie zastosowanie w lotnictwie jest glin - stopy glinu mają wysoką twardość i niewielki ciężar właściwy. Celem prac prowadzonych w 2010 roku wspólnie z zespołem z Politechniki Śląskiej było opracowanie metody wytwarzania powłok ochronnych stopach glinu i tytanu, które zwiększyłyby odporność na korozję w agresywnych środowiskach występujących podczas eksploatacji samolotów.

Pomiary prowadzono na próbkach przygotowanych w Politechnice Śląskiej. Badano 3 serie próbek – dwie serie na stopach tytanu i jedną serię na stopie glinu, na powierzchni których wytworzone zostały konwersyjne warstwy wierzchnie, stanowiące dodatkowe zabezpieczenie przed korozją. Próbki różniły się składem kąpielii pasywującej (stosowane były kąpiele: fluorokrzemianowa, fosforanowa, kąpiel zawierająca szkło wodne i kąpiel zawierająca kwas szczawiowy dla stopu glinu), oraz warunkami prowadzenia procesu pasywacji (czas, temperatura i napięcie pasywacji). Pomiary odporności korozyjnej prowadzono w 5 % roztworze NaCl w temperaturze 25 lub 30°C. Dla każdej próbki wykonywano serię widm impedancyjnych w określonych odstępach czasu, śledząc zmiany oporności polaryzacyjnej. Widma impedancyjne opracowywano poprzez dopasowanie metodą najmniejszych kwadratów równania opisującego impedancję wybranego zastępczego układu elektrycznego, co pozwalało obliczyć oporność polaryzacyjną próbki.

Próbki w bardzo znacznym stopniu różniły się odpornością na korozję. Z pośród powłok otrzymywanych na stopach tytanu najbardziej trwałe były powłoki otrzymane z kąpielii zawierających szkło wodne. Oporność polaryzacyjna niektórych próbek z tej serii pozostawała niezmienną przez 3 miesiące. Powłoki otrzymane z kąpielii, których głównym składnikiem był kwas fosforowy charakteryzowały się mniejszą trwałością, przy czym trwalsze okazały się powłoki otrzymane podczas anodyzacji wyższymi napięciami. Powłoki otrzymane z roztworów kwasu fluorokrzemowego charakteryzują jedynie niewielkim wzrostem oporu polaryzacyjnego porównaniu do próbek niezabezpieczonych. Pośród powłok naniesionych na powierzchnie stopu glinu najwyższymi odpornościami charakteryzują się otrzymane przy napięciu anodyzacji 40 V oraz czasie anodyzacji 60 minut. Najodporniejsze na korozję powłoki otrzymano dla stężenia kwasu szczawiowego równego 80 g·cm<sup>-3</sup>.

## **KRAJOWE SIECI BADAWCZE**





## 2. SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(koordynator sieci: prof. Piotr Warszyński)

Podstawowym celem Sieci Naukowej SURUZ jest rozwinięcie współpracy naukowej pomiędzy zespołami dla optymalnego wykorzystania potencjału naukowego oraz zaplecza aparaturowego znajdującego się w różnych ośrodkach naukowych w Polsce, zajmujących się badaniami nad substancjami powierzchniowo aktywnymi (surfaktanty) i układami koloidalnymi. Prace naukowe zespołów sieci obejmują zarówno badania podstawowe jak i aplikacyjne nad nowymi surfaktantami i technologiami wykorzystującymi układy zdyspergowane, cienkie filmy, warstwy adsorpcyjne, etc. W realizacji projektu SURUZ uczestniczą zespoły z 11 instytucji naukowych w całej Polsce. Sieć jest koordynowana przez IKiFP PAN (koordynator – prof. P. Warszyński).

Zadania przewidziane do wykonania w ramach działalności Sieci można podzielić następująco:

- Realizacja wspólnych tematów badawczych uzupełniających lub komplementarnych w stosunku do zadań wykonywanych w ramach podstawowej działalności statutowej jednostek tworzących sieć naukową. Cele tych tematów badawczych zostały przedstawione poniżej.
- Wymiana kadry naukowej i doktorantów w celu zoptymalizowania wykorzystania infrastruktury badawczej, którą dysponują poszczególni uczestnicy Sieci. Rozszerzenie możliwości stosowania komplementarnych technik badawczych w celu rozwiązywania problemów naukowych.
- Organizacja warsztatów naukowych skierowanych głównie do młodych naukowców, tworzących im możliwość przedyskutowania uzyskanych wyników badawczych i rozwiązania pojawiających się problemów wraz z doświadczonymi pracownikami naukowymi.
- Organizacja spotkań sieciowych zespołów naukowych uczestniczących w projekcie w celu przedstawienia głównych osiągnięć i przedyskutowania wyników.
- Rozszerzenie tematyki badawczej w celu przygotowania wspólnych projektów badawczych, krajowych i międzynarodowych, zwłaszcza w ramach 7-mego Programu Ramowego Unii Europejskiej.
- Koordynacja prac Sieci, ustanowienie i kontrola realizacji zadań naukowych Sieci, zaplanowanie wydatków na poszczególne zadania i kontrolowanie prawidłowości spożytkowania przyznanych funduszy.

Badania naukowe proponowane w ramach działalności Sieci Naukowej „SURUZ” zawierają się w zakresie trzech priorytetów tematycznych, w ramach których będą realizowane następujące projekty badawcze:

- I. Surfaktanty i układy zdyspergowane – synteza i charakterystyka fizykochemiczna.
- II. Układy dyspersyjne o znaczeniu biomedycznym.
- III. Układy dyspersyjne o znaczeniu technologicznym.

#### **4. PV-TECH Rozwój nowych technologii i technik badawczych w dziedzinie krzemowych fotoogniw**

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(kierownik tematu: dr Robert Socha)

Zwiększone zapotrzebowanie przemysłu oraz gospodarstw domowych na energię oraz konieczność dostosowania się do wymagań odnośnie emisji CO<sub>2</sub>, powodują, że „czysta” energia uzyskiwana z ogniw fotowoltaicznych zyskuje na znaczeniu. Dodatkowo, niedostatek krzemu na rynkach międzynarodowych, wraz z rosnącą jego ceną, prowadzi do potrzeby wykorzystania odpadów przemysłu elektronicznego i produkcji tzw. multikrystalicznych taśm krzemowych, które z powodzeniem zaczynają być wykorzystywane w fotowoltaice. Sieć PV-Tech ma służyć m.in. rozwiązywaniu powyższych problemów, dlatego też celami projektu są:

- a) rozwój nowych technologii produkcji ogniw fotowoltaicznych w tym przede wszystkim ogniw opartych na taśmach krzemu multikrystalicznego, oraz
- b) rozwój metod badawczych związanych z produkcją oraz analizą właściwości finalnego produktu.

W ramach projektu IKiFP PAN wykonuje głównie prace analityczne pośrednich oraz końcowych etapów przygotowywania płytek/taśm krzemu do pracy w ogniwach fotowoltaicznych. Etapy te to m.in. nanoszenie katalizatorów do trawienia powierzchni krzemu, trawienie powierzchni krzemu oraz wytwarzanie kontaktów elektrycznych. W badaniach tych wykonuje się charakterystykę powierzchni dostarczonych próbek przy użyciu technik mikroskopowych (SEM) oraz spektroskopowych (XPS, AES, EDXS). Ponadto, IKiFP PAN dostarcza testowe próbki związków mogących służyć jako katalizatory procesu trawienia oraz jako substancje zwiększające wewnętrzny współczynnik odbicia światła w ogniwie.

## **5. BIONAN Molekularne mechanizmy oddziaływań w nanoukładach biologicznych oraz w układach aktywnych biologicznie modyfikowanych nanocząstkami**

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(kierownicy tematu: prof. Piotr Warszyński, prof. Józef Korecki)

Poznanie mechanizmów molekularnych odpowiedzialnych za zmiany płynności błon biologicznych jest niezwykle ważne nie tylko dla biologów, ale i dla lekarzy, farmakologów, a także fizyków i chemików zajmujących się procesami katalitycznymi. Wiadomo, że w organizmach żywych zachodzą procesy destrukcyjne związane ze stresem oksydacyjnym, w wyniku którego powstaje tlen singletowy lub wolnorodnikowe formy tlenu, niszczące struktury białkowe i lipidowe. Znajomość mechanizmu molekularnego umożliwiającego sterowanie wymienionymi procesami będzie kluczowa w projektowaniu leków nowej generacji, wykorzystujących kapsułkowanie substancji farmakologicznie czynnych. Kapsułki powinny docierać wyłącznie do miejsc docelowych w organizmie i być dawkowane w odpowiednim stężeniu; stąd bezinwazyjna metoda sterowania ich transportem i przepuszczalnością jest niezwykle pożądana. Zastosowanie nanosensorów czy też nanomarkerów bazujących na modyfikowanych nanorurkach węglowych, wykazujących znikomą toksyczność dla organizmów żywych, może znacznie poprawić selektywność i efektywność działania leków w kapsułkach.

Pierwszym krokiem do osiągnięcia tego celu są prace zaproponowane w ramach sieci BIONAN, które sprowadzają się do badania aktywności układów biologicznie czynnych w zależności od ich interakcji z powierzchniami o zdefiniowanych właściwościach fizykochemicznych, bądź z nanocząstkami znajdującymi się w roztworze. Poznanie mechanizmów adhezyjnych na poziomie molekularnym, a więc oddziaływań w obszarze interfazy biomolekuła (błona) – nanowarstwa, wniesie istotny wkład w wiedzę niezbędną do świadomego modelowania układów o wymaganej dynamice molekularnej oraz powinowactwie do określonych struktur.

Przedmiotem działania sieci naukowej BIONAN jest:

- I. Zintegrowanie wspólnych działań fizyków, chemików i biologów w badaniu naturalnych błon fotosyntetycznych i ich sztucznych odpowiedników modelowych zawieszonych w roztworach lub przenoszonych na zdefiniowane stałe powierzchnie;
- II. Zbadanie własności fizykochemicznych układów naturalnych i sztucznych pod wpływem kontrolowanych zmiennych czynników zewnętrznych;
- III. Ustalenie optymalnych warunków środowiska i własności podłoża dla uzyskania jak najwyższej aktywności badanych układów biologicznie czynnych bądź uzyskania aktywności biochemicznej w układach modelowych.
- IV. Wypracowanie metodyki tworzenia układów bioaktywnych o zadanych własnościach powierzchniowych.
- V. Ewaluacja nanoukładów biologicznych (składników błon fotosyntetycznych) jako platformy do konstrukcji nanoukładów do konwersji energii świetlnej w chemiczną.

Sieć naukowa BIONAN jest koordynowana przez Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH.



## **INICJATYWA TECHNOLOGICZNA I**



# 1. Opracowanie nowej bezodpadowej technologii otrzymywania cykloheksanolu/cykloheksanonu (półproduktów do syntezy Nylonu 6 i Nylonu 66) z benzenu poprzez cykloheksen



Projekt badawczy Inicjatywa Technologiczna I KB/69/13848/IT1-B/U/08  
(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

W roku 2010 realizowano fazę B projektu, poświęconą przygotowaniu opracowanej technologii otrzymywania cykloheksanolu/cykloheksanonu do wdrożenia. Projekt realizowano we współpracy z Instytutem Chemii Przemysłowej w Warszawie. Jako podstawę realizacji zadania przyjęto wyniki uzyskane w okresie realizacji fazy A, przedstawione w raporcie końcowym po fazie A w grudniu 2009, w szczególności w zakresie rezultatów otrzymanych w ramach doświadczeń prowadzonych w skali wielkolaboratoryjnej. Pozwoliły one na ustalenie optymalnych warunków ciśnienia i temperatury procesów uwodornienia benzenu i uwodnienia cykloheksenu oraz wytypowanie najbardziej obiecujących katalizatorów do obu procesów. W przypadku uwodornienia jest to katalizator rutenowy, a w przypadku uwodnienia, katalizator zeolitowy. W ramach opracowania założeń dla projektu procesowego w IKiFP PAN prowadzono badania uzupełniające w zakresie dalszej optymalizacji katalizatora do procesu uwodornienia, pod kątem określenia wpływu preparatyki katalizatora rutenowego na przebieg procesu. Badano także znaczenie, jakie dla przebiegu procesu ma sposób dozowania reagentów. Wykazano, że dozowanie bezpośrednio substancji sypkich, bez uprzedniego przygotowywania roztworów, jest w niektórych przypadkach korzystne. W trakcie realizacji zadania stwierdzono, że czynnikami mającymi decydujące znaczenie dla opracowania założeń dla projektu procesowego są m.in. właściwości fizykochemiczne mediów (reagentów, katalizatorów) oraz ilościowa ocena zużycia surowców i katalizatorów. Projekt procesowy instalacji produkcyjno-doświadczalnej do syntezy cykloheksanolu z benzenu poprzez cykloheksen o zdolności produkcyjnej ok. 1000 ton/rok w przeliczeniu na cykloheksanol został opracowany przez specjalistyczne Biuro Projektów Zakładów Azotowych "Biprozat" w Tarnowie, pod nadzorem autorskim IKiFP PAN i IChP. Przy projektowaniu przyjęto, że wszystkie węzły produkcyjne będą pracowały w sposób ciągły. Wyjątek będzie stanowił węzeł przygotowania katalizatora, który będzie pracował w sposób periodyczny. W projekcie uwzględniono między innymi:

1. roczny czas pracy instalacji wyniesie 8000 godzin,
2. czas eksploatacji instalacji wyniesie 15 lat,
3. rezerwa projektowa instalacji wyniesie 20 %,
4. możliwość całkowitego opróżniania reaktorów uwodornienia,
5. minimalne wymagania jakościowe stosowanych chemikaliów,
6. sposób transportowania surowców, produktów oraz katalizatorów,
7. pojemność stosowanych reaktorów,
8. rodzaj użytych materiałów konstrukcyjnych,
9. sposób sterowania procesem,
10. sposób regeneracji katalizatora.

Instalacja produkcji cykloheksanolu z benzenu poprzez cykloheksen nie stanowi źródła odpadów. Cykloheksan powstający jako produkt uboczny w węźle uwodornienia jest cennym substratem do produkcji mieszaniny cykloheksanol-cykloheksanon.





## **PROJEKT "HOMING PLUS" (FNP)**



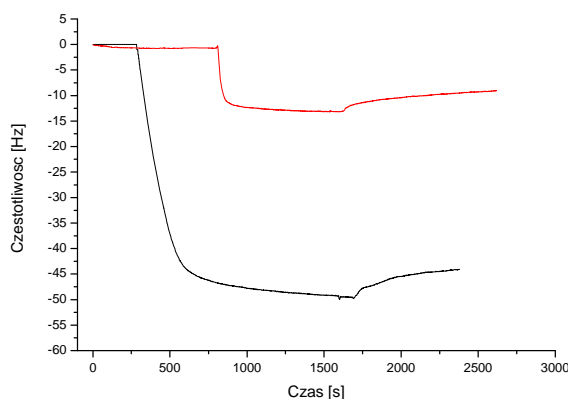
# 1. Structure and Electric Properties of the Composite Films Containing Conductive Nanoparticles

Projekt Homing Plus (FNP) 2010-1/8 [2010-2012]

(kierownik projektu: dr Marta Kolasińska-Sojka)

W oparciu o przegląd literaturowy wybrano błękit pruski, jako przewodzące, elektroaktywne nanocząstki, posiadające zdolność detekcji wybranych substancji chemicznych, jak nadtlenek wodoru lub para wodna. Początkowym etapem projektu było opracowanie optymalnej metody syntezy nanocząstek błękitu pruskiego. W celu charakteryzacji otrzymanych cząstek wykonano pomiary, mające na celu określenie wielkości uzyskanych cząstek, ich potencjał zeta, oraz stabilność (zmiany wielkości i ładunku w czasie). Pomiary potencjału zeta oraz wielkości nanocząstek zostały wykonane aparatem Zetasizer Nano firmy Malvern Instruments Ltd. Na podstawie przeprowadzonych doświadczeń, do dalszych badań wytypowano jedną z kilku alternatywnych metod otrzymywania nanocząstek błękitu pruskiego.

Nanokompozyty: polielektrolit/błękit pruski otrzymano techniką sekwencyjnej adsorpcji z roztworów przeciwnie naładowanych polijonów/cząstek. Kolejnym etapem pracy były badania adsorpcji nanocząstek na powierzchni filmów polielektrolitowych. Zostały one przeprowadzone *in situ* za pomocą mikrowagi kwarcowej (QCM - quartz crystal microbalance). Wykazano, że ilość osadzonego błękitu zależy od rodzaju filmu polielektrolitowego, na którym zachodzi adsorpcja. Na Rysunku 1 przedstawiono przykładowe wyniki kinetyk osadzania błękitu na warstwie polietylenoiminy zaadsorbowanej z roztworu o pH=10.3 (czarna krzywa) oraz z roztworu o pH=7 (czerwona krzywa).



Rys.1. Spadek częstotliwości drgań kryształu QCM odpowiadający wzrostowi masy na skutek adsorpcji błękitu pruskiego na warstwie polietylenoiminy osadzonej z roztworu o pH=10.3 (czarna krzywa) oraz z roztworu o pH=7 (czerwona krzywa)

Następnie, wykonując woltamperometrię cykliczną na wirującej elektrodzie dyskowej Metrohm Autolab B.V., zbadano właściwości elektrochemiczne wielowarstw polielektrolitowych z wbudowanymi nanocząstkami błękitu. Odpowiedź prądowa w elektrolicie podstawowym zależała od ilości warstw błękitu pruskiego w danej multiwarstwie. Natężenie prądu redox rosło wraz ze wzrostem liczby nakładanych warstw.



## **PROJEKTY 6. PROGRAMU RAMOWEGO UE**



## 1. IDECAT Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production



Projekt EU 6<sup>th</sup> FP NMP2-011730-2 IDECAT (NoE) [2005-2010]  
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Projekt IDECAT jest Siecią Doskonałości powstałą w 2005, finansowaną ze środków 6. Programu Ramowego UE. Sieć jest koordynowana przez Departament Chemii Przemysłowej i Inżynierii Materiałowej Uniwersytetu w Mesynie we Włoszech i skupia 37 laboratoriów z 17 instytucji: Consorzio Interuniversitario per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, Włochy; Ghent University, Belgia; Katholieke University Leuven, Belgia; J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Czechy; Helsinki University of Technology, Finlandia; Centre Nationale de la Recherche Scientifique, Francja; Max-Planck-Gesellschaft, Niemcy; Leibnitz Institute of Organic Catalysis, Niemcy; Technische University Munchen, Niemcy; Consiglio Nazionale delle Ricerche, Włochy; NRSC-Catalysis, Holandia; Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni, Polska; Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, Hiszpania; Stockholm University, Szwecja; University St. Andrews, Anglia; University of Southampton, Anglia; Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Szwajcaria.

Formalnie realizacja projektu została zakończona w 2010 roku. Celem sieci była integracja środowisk naukowych zajmujących się zagadnieniami katalizy homogenicznej, heterogenicznej i biokatalizy poprzez stworzenie ram dla badań, edukacji, promocji nauki, rozprzestrzeniania wiedzy i transferu technologii. Projekt podzielony został na 5 grup zadań: Wspólny Program Integracji, Wspólny Program Badań, Wspólny Program Rozpowszechniania Wiedzy, Wspólny Program Transferu Wiedzy i Technologii oraz Zarządzanie, w ramach których funkcjonuje 13 Pakietów Zadań.



Trwałym wynikiem realizacji projektu jest wirtualny Europejski Instytut badawczy w dziedzinie Katalizy (ERIC), który jest stowarzyszeniem non-profit, skupiającym większość partnerów sieci IDECAT, a pozostałych integrując na zasadzie Porozumienia Ramowego. Celem stowarzyszenia jest stworzenie platformy skupiającej jak największą ilość partnerów, operujących szerokim wachlarzem specjalizacji i oferujących swoje usługi dla klientów, w tym małych i średnich przedsiębiorstw. ERIC ma być również postrzegany jako forum wymiany informacji i doświadczeń o najnowszych trendach i zapotrzebowaniach w dziedzinie katalizy w Europie i na świecie.

Dyrektor IKiFP PAN został powołany w skład jego Rady Dyrektorów.

16 lutego 2010 we Florencji odbyło się spotkanie Rady Dyrektorów ERIC, na którym zaprezentowany został projekt strony internetowej stowarzyszenia, oraz przedyskutowane zostały sprawy związane w przystąpieniem nowych partnerów akademickich i przemysłowych, niebędących członkami sieci IDECAT.

IKiFP PAN wraz z belgijskim Uniwersytetem w Ghent koordynuje prace dotyczące przygotowania narzędzi internetowych pozwalających na efektywną komunikację i wymianę informacji pomiędzy Partnerami sieci.

W ramach Pakietu "Tworzenie i udoskonalanie nanoobjektów oraz nanoorganizacja" Instytut uczestniczył w bi lub multilateralnych projektach badawczych: "Nanostructured multimodal porous materials with grafted organometallic single-sites – new catalysis for alkane metathesis and C-H bond activation", "Design of new catalysts based on nanostructured micr-mesoporous solid acids for environmentally clean diesel fuels", "Nanostructured carbon composites for bio-sensing applications" i "Novel catalysts based on organometallic macrocycles supported on porous structures derived from layered minerals".



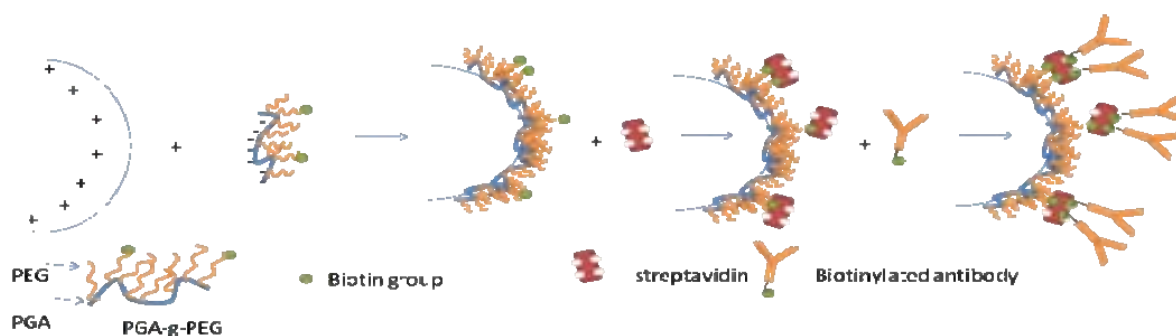
## 2. NANOMEDPART Multifunctional Particulate System for Nanomedicine

EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MATERA Projekt SPR NANOMEDPART [2007-2010] (KOORDYNACJA)  
(koordynator projektu: prof Piotr Warszyński)

Nanotechnologia, rozumiana jako tworzenie i kontrola właściwości obiektów o skali nanometrycznej, odgrywa coraz istotniejszą rolę w medycynie i farmakologii. Nanomedycyna, której jednym z wiodących nurtów jest zastosowanie nanocząstek/nanokapsulek dla celów terapeutycznych, jest jedną z najszybciej rozwijających się dziedzin nauki. Enkapsulacja związków aktywnych, często niestabilnych, czy reaktywnych chroni te związki przed wpływem zewnętrznego środowiska, przed ich degradacją. Pozwala również zwiększyć zgodność/dostępność nierozpuszczalnych w wodzie związków w środowisku wodnym. Głównymi zaletami nanokapsulek są subkomórkowe rozmiary i tkankowo-komórkowa biokompatybilność, co umożliwia uzyskanie specyficznego, kontrolowanego systemu dostarczania i uwalniania substancji aktywnych. Podawanie leków w postaci kapsułkowanej wydłuża okres ich działania, umożliwia kontrolę wydzielanej dawki, a odpowiednia modyfikacja powłoki cząstki umożliwia tzw. „*intelligent targeting*”, czyli uwalnianie leku w odpowiednim miejscu organizmu.

Celem niniejszego projektu było opracowanie podstaw naukowych nowych technologii wytwarzania nanocząstek organicznych, nieorganicznych, metalicznych lub kompozytowych do późniejszego zastosowania ich jako rdzeni mikrokapsulek do kontrolowanego transportu substancji leczniczych (antybakteryjnych, antywirusowych i antybakteryjnych) lub jako nośników dla rozpoznawania molekularnego (molecular sensing). Głównym celem badawczym realizowanym przez IKiFP PAN było opracowanie technik otrzymywania nanocząstek i nanokapsulek zawierających aktywne związki z powłokami przystosowanymi do terapii rakowych i antybakteryjnych. Projekt był realizowany przy współpracy z SINTEF Materials and Chemistry Oslo, Hebrew University Jerusalem, Institute for Cancer Research at the Norwegian Radium Hospital Oslo i Politechniką Wrocławską.

W 2010 roku skupiono się na modyfikacji/funkcjonalizacji powłok kapsulek do zastosowań biomedycznych. Tworzenie korony PEG (glikolu polietylenowego) na powierzchni kapsulek jest jedną z możliwych dróg eliminacji niespecyficznego wiązania białek do powierzchni kapsułki (opsonizacji) oraz dalszej eliminacji kapsulek z organizmu. Dodatkowo łańcuchy PEG mogą być funkcjonalizowane poprzez immobilizację odpowiednich ligandów kierunkowych. Biotynylowane nanokapsułki zostały otrzymane przy użyciu zsyntetyzowanego kopolimeru PGA-g-PEG-Biotin. Streptawidyna została użyta jako łącznik pomiędzy biotynylowaną kapsułką a biotynylowanym przeciwciałem.



Rys. 1. Schemat modyfikacji/funkcjonalizacji kapsulek

Otrzymane kapsułki AOT(PLL/PGA)<sub>3,5</sub>PGA-g-PEG poddano testom cytotoksyczności, z których wynika, że kapsułki były nietoksyczne i wykazywały zaniedbywalne niespecyficzne wiązanie do komórek krwi

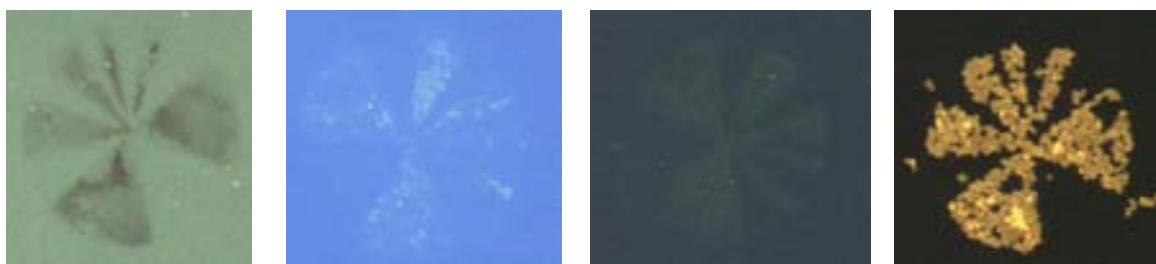
### 3. PARFUN Nanoscale Surface Treatments to Functionalise Polymer Particles for Electronic Applications



EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MNT Projekt SPR PARFUN [2008-2011]  
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania nowej generacji mikrocząstek służących jako przekładki dystansowe („spacery”) w wyświetlaczach ciekłokrystalicznych (LCD). Technologia opiera się o modyfikację powierzchni mikrocząstek polimerowych w sposób, który przyczyni się do udoskonalenia produkcji ekranów LCD. Do tej pory jednym z głównych problemów w produkcji wyświetlaczy LCD jest wyprodukowanie mikrocząstek o wymaganej średnicy i żądanych właściwościach powierzchniowych. Zastosowanie giętkich, elastycznych wyświetlaczy, które mogą być zginane i skręcane w trakcie ich użytkowania, wymaga dużo większej siły adhezji pomiędzy „spacerem” a wewnętrzną powierzchnią wyświetlacza niż to było potrzebne w sztywnych wyświetlaczach LCD. Nowa technologia produkcji wyświetlaczy wymusza także udoskonalenie techniki wprowadzania do ich wnętrza „spacerów” w sposób uporządkowany.

Celem naszego udziału w projekcie jest rozwinięcie metod modyfikacji powierzchni szkła i/lub płytek plastikowych (poliimidowych- PI) w sposób pozwalający na lepszą adhezję mikronowych, polistyrenowych cząstek do tych powierzchni według zaprojektowanego wzoru. Do powierzchniowej modyfikacji płytek użyty został kationowy polielektrolit – polietylenoimina (PEI) o masie molowej 700 kD, który był adsorbowany na płytkach szklanych lub poliimidowych z roztworów: wody, etanolu lub izopropanolu o stężeniach PEI 500 ppm poprzez za pomocą metody mikro nanoszenia kontaktowego (microcontact printing) oraz adhezji cząstek lateksowych, dostarczonych przez firmę Conpart, z zawiesin etanolu i izopropanolu. Rysunek 1 ilustruje obraz uzyskanego wzorca w postaci warstwy PEI o średniej grubości 10 nm na powierzchni krzemu oraz naniesione nań cząsteczki lateksowe o różnej średnicy



Rys. 1. Obraz wzorca naniesionego metodą kontaktową na płytkę krzemową. Od lewej: warstwa PEI o średniej grubości 10 nm (mikroskop polaryzacyjny), ten sam wzór obserwowany techniką SARFUS, warstwa PEI z naniesionymi cząstkami lateksowymi znaczonej fluorescencyjnie (średnica 100 nm), warstwa PEI z naniesionymi cząstkami lateksowymi o średnicy 3.8  $\mu\text{m}$

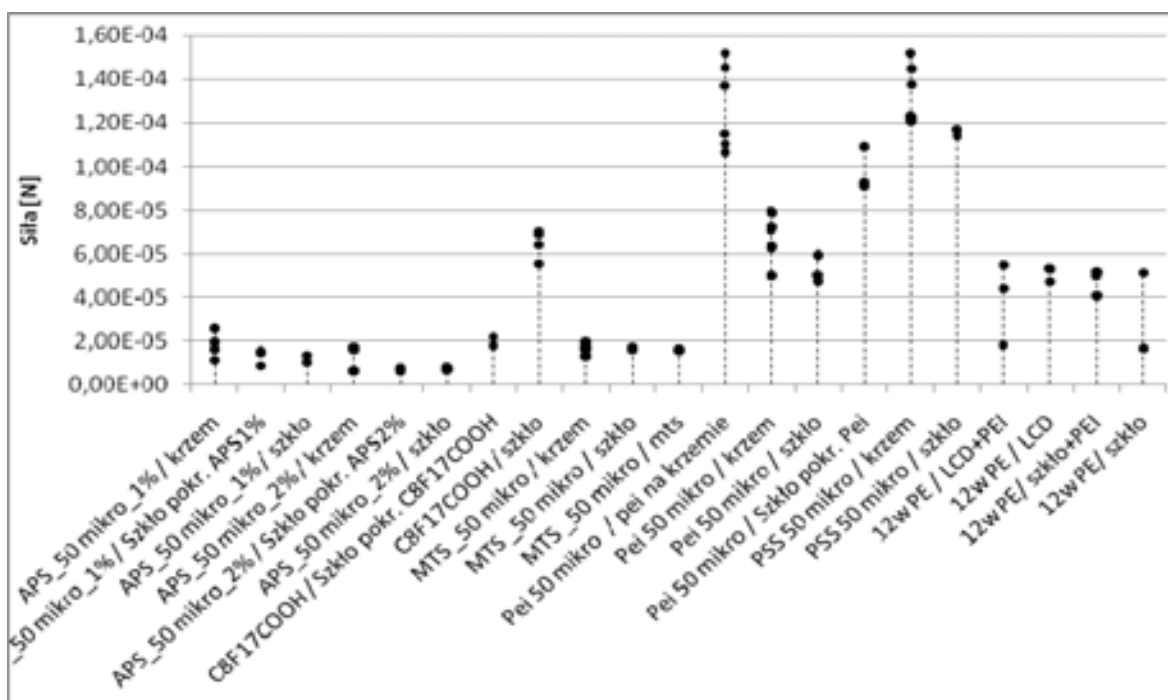
Stwierdzono wysoką selektywność adhezji cząstek na powierzchni pokrytej PEI w stosunku do niepokrytej, która wynosiła 10:1 dla płytek poliimidowych oraz 300:1 dla płytek szklanych. W celu otrzymania przewodzących cząstek dystansowych, cząstki polistyrenowe były pokrywane nanocząstkami srebra w połączeniu z przewodzącymi polielektrolitami (PDOT-PSS, polipyrrol), po czym badano właściwości mechaniczne tak zmodyfikowanych cząstek.

#### 4. NANOREP II Multifunctional Surface Coatings and Highly Scratch Resistant Plastic Parts

EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MNT Projekt SPR NANOREP II [2008-2011]  
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu jest opracowanie metodologii dotyczącej zastosowania wielofunkcyjnych nanocząstek i nanostrukturalnych materiałów powłokowych do produkcji wysokiej jakości polimerów. Projekt jest realizowany przez międzynarodową sieć laboratoriów badawczych, których działania w dziedzinie nanomateriałów i nanocząstek, będą sprzyjać implementacji nanotechnologii do zastosowań technologicznych i wytwarzania produktów na skalę przemysłową.

Kontynuowano badania mające na celu optymalizację metody modyfikacji powierzchni szklanych kulek pod kątem kompatybilności oraz silnej adhezji do tworzyw termoplastycznych i fluoropolimerowych. Adhezję mikrosfer badano przy pomocy Mikroskopu Sił Atomowych z koloidalną sondą (colloidal probe AFM), mierząc siłę oddziaływania szklanej mikrocząstki o średnicy 20-50  $\mu\text{m}$  doczepionej do dźwigni mikroskopu z różnymi powierzchniami (szkło, krzem, szkło oraz krzem modyfikowane poprzez adsorpcję surfaktantów i polielektrolitów). Rysunek 1. ilustruje zestawienia wyników pomiarów sił adhezji pomiędzy szklaną mikrocząstką o różnej modyfikacji powierzchniowej oraz powierzchniami szklanymi, krzemowymi i poliamidowymi. Mierzone siły adhezji mieściły się w zakresie od  $8.2 \cdot 10^{-7}$  N do  $1.5 \cdot 10^{-4}$  N, przy czym miały największą wartość w przypadku podobnej modyfikacji powierzchniowej oddziaływających obiektów.



Rys.1. Wielkość siły adhezji pomiędzy modyfikowaną powierzchniowo szklaną mikrocząstką a różnymi powierzchniami.

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



# 1. InGAS Integrated Gas Powertrain – Low Emission, CO<sub>2</sub> Optimised and Efficient CNG Engines for Passenger Cars and Light Duty Vehicles



Projekt EC 7<sup>th</sup> FP SCP7-GA-2008-218447 InGAS (CP) [2008-2011]

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

InGAS jest tzw. dużym międzynarodowym projektem badawczym realizowanym w ramach 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej - Collaborative Project. W projekcie bierze udział 28 partnerów akademickich i przemysłowych z 11 krajów europejskich: Austrii, Czech, Danii, Finlandii, Francji, Luksemburga, Niemiec, Polski, Szwecji, Szwajcarii i Włoch. Koordynatorem Konsorcjum jest Centro Ricerche Fiat SCpA. Projekt realizowany jest od 1 października 2008. Celem projektu InGAS jest opracowanie silników masowego użytku napędzanych sprężonym gazem ziemnym, przeznaczonych dla samochodów osobowych i lekkich samochodów ciężarowych, zaopatrzonych w zintegrowany system oczyszczania spalin, mogących osiągnąć wydajność konwersji paliwa o 10 % wyższą niż odpowiednie pojazdy napędzane silnikiem Diesla z 2006, o poziomie emisji niższym niż norma Euro 6.

IKiFP PAN jest zaangażowany w prace w Subprojekcie B2, "Systemy oczyszczania dla samochodów osobowych z silnikiem CNG", w Zadaniu B2.2 (WP B2.2) "Opracowanie zaawansowanych katalizatorów". Celem prowadzonych w IKiFP PAN prac jest zaprojektowanie, synteza, charakteryzacja oraz katalityczne testowanie nowych katalizatorów dla reakcji dopalania metanu w gazach wydechowych silników CNG, w oparciu o mieszane tlenki metali przejściowych.

W 2010 główne prace dotyczyły optymalizacji syntezy katalizatorów typu mieszanych tlenków, otrzymywanych z prekursorów hydrotalkitowych lub w drodze syntezy zol-żel z prekursorów cytrynianowych. Właściwości fizyko-chemiczne określono metodą analizy chemicznej, XRD, SEM, XPS, FT-IR, analizy termicznej, adsorpcji azotu w temperaturze 77 K i termoprogramowanej redukcji w przepływie wodoru. Wykazano, że dodatek pewnych promotorów na etapie syntezy prekursorów daje efekt synergetyczny i jest korzystne dla aktywności katalitycznej. Również zastosowanie odpowiedniego nośnika poprawia właściwości katalityczne dzięki stabilizacji dyspersji spinelowej fazy aktywnej, zapobiega jej termicznej degradacji i ułatwia nanoszenie warstwy aktywnej na nośnik monolitowy. Wybrane formuły katalizatora wytrzymują test starzenia termicznego w 600°C bez utraty aktywności katalitycznej.



## 2. NEXT-GTL Innovative Catalytic Technologies & Materials for Next Gas to Liquid Processes

Projekt EC 7<sup>th</sup> FP NEXT-GTL (IP) [2008-2011]  
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

### Struktura elektronowa heteropolikwasów

Wykonano obliczenia struktury elektronowej anionów heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych ( $\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$  i  $\text{PW}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$ ) z podstawionymi jonami metali przejściowych (np. Co, Fe, Cu, V, Mo, Mn) w pozycji addenda. Obliczenia wykonywano stosując zarówno model klasterowy (program Turbomole) jak i model periodyczny (program VASP). Wyniki pozwoliły na szczegółowe porównanie właściwości układów HPA molibdenowych i wolframowych. Różnice pomiędzy HPMo, HPW dotyczą: rozkładu ładunków; pozycji orbitali granicznych; wielkości przerwy energetycznej; długości wiązań; położenia głównych pasm w widmie IR. Z kolei obecność podstawionych atomów addenda ma zasadniczy wpływ na energię tworzenia wakancji tlenowych w strukturze jonu Keggina, co przekłada się bezpośrednio na aktywność w procesach utleniania.

### Modelowanie oddziaływania kompleksów Pt/Pd(NHC)Cl<sub>2</sub> z metanem

Wykonano obliczenia struktury elektronowej kompleksów Pt/Pd(NHC)Cl<sub>2</sub> oraz wybranych etapów adsorpcji metanu (lub kationu  $\text{CH}_3^+$ ) na tych kompleksach. Oba metale tworzą lekko zniekształcone kompleksy kwadratowe, w których orbitale HOMO i LUMO zlokalizowane są głównie na centrach metalicznych. Zakłada się dwa możliwe scenariusze aktywacji metanu. W pierwszym, następuje dysocjacja jednego liganda Cl i metan przyłączany jest do trójkoordynacyjnego kompleksu. Stwierdzono, że oderwanie jonu Cl jest procesem termodynamicznie uprzywilejowanym. Określono struktury geometryczną i elektronową potencjalnie tworzonych kompleksów Pt/Pd(NHC)ClCH<sub>3</sub> oraz Pt/Pd(NHC)ClHCH<sub>3</sub>. Drugi mechanizm zakłada bezpośrednie zaangażowanie liganda chlorkowego w aktywację wiązania C-H metanu. Dotychczasowe obliczenia wskazują, że warunkiem koniecznym zajścia tego procesu jest wzbudzenie katalizatora ze stanu podstawowego (singlet) do stanu wzbudzonego (tryplet), gdzie oddziaływanie centrum aktywnego z metanem powoduje znaczne (o 0.83 Å) wydłużenie jednego z wiązań metal - ligand.

### Struktura elektronowa MoOxCy

W ramach projektu wykonano obliczenia małych klasterów molibdenowo-tlenowych (programem Turbomole) w celu otrzymania materiałów porównawczych dla obliczeń karbidków, które z powodzeniem stosowane są w zeolitach do aktywacji wiązania C-H. Wstępne obliczenia dotyczyły badania właściwości elektronowych centrów aktywnych w małych klasterach molibdenowo-tlenowych o geometrii tlenku molibdenu(VI)-MoO<sub>3</sub> i zredukowanego tlenku molibdenu(IV)-MoO<sub>2</sub>. Wyniki obliczeń pokazały: silną zależność ładunków na centrach metalicznych i mostkowych centrach tlenowych od rozmiaru klastera; słabą zależność ładunku na tlenach pojedynczo skoordynowanych z Mo od rozmiaru klastera; silną zależność rzędów wiązań od wielkości klastera. Przeprowadzono także symulacje (programem VASP) periodycznej struktury MoO<sub>3</sub>, w której dwa atomy tlenu w każdej komórce elementarnej zostały zastąpione atomami węgla. Zaobserwowano znaczne zmiany w geometrii układu. W kilku przypadkach utworzone zostały grupy CO łączące dwa sąsiednie centra molibdenowe. Zaobserwowano także tworzenie się wiązań C-C. Zmianom geometrii towarzyszy duży (ok. 4 eV) efekt stabilizacyjny.

### 3. MUST Multi-level Protection of Materials for Vehicles by "Smart" Nanocontainers



Projekt EC 7<sup>th</sup> FP NMP3-LA-2008-214261 MUST (CP) [2008-2012]  
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Celem projektu MUST jest stworzenie nowego, aktywnego "samonaprawczego" systemu ochrony dla przyszłościowych materiałów konstrukcyjnych dla pojazdów, w oparciu o nanokapsułki uwalniające w "inteligentny" sposób czynniki antykorozyjne, wbudowane w powłokę polimerową. Przedmiotem badań w IkiFP PAN w roku 2010 była dyfuzja wody w warstwach polimerowych oraz kompatybilność nanokapsulek i cząstek wychwytyjących wodę z powłoką polimerową.

Badano dwa modelowe pokrycia antykorozyjne, dostarczone przez innych partnerów projektu: żywicę epoksydową na bazie rozpuszczalnika organicznego i żywicę epoksydową na osnowie wodnej. Jako czynników wychwytyjących wodę użyto syntetycznego warstwowego krzemianowego minerału laponitu oraz syntetycznego hydrożelu. Czynniki te, oraz wybrane nanokapsułki zawierające merkaptobenzotiazol lub azotan ceru były dyspergowane w żywicy, z której sporządzano matrycę polimerową. W badaniach zastosowano spektroskopię całkowitego wewnętrznego odbicia w zakresie promieniowania podczerwonego (IR ATR), skaningową mikroskopię elektronową (SEM), mikroskopię fluorescencyjną (FM), elektrochemiczną spektroskopię impedancyjną (EIS) i spektroskopię fotoelektronów generowanych promieniowaniem X (XPS).

Przygotowano pakiet programów służących do symulacji dyfuzji wody w matrycy polimerowej. Wyniki pomiarów szybkości dyfuzji wody, otrzymane techniką IR ATR porównywano z wynikami cyfrowej symulacji tego procesu. Uzyskano dobrą zgodność wyników doświadczalnych z przewidywaniami z symulacji cyfrowej. Zmierzono wartość współczynników dyfuzji wody w badanych polimerach. Współczynniki te były następnie użyte w symulacji zachowania się pokryć polimerowych w kontakcie ze środowiskiem korozyjnym.

Jednym z rodzajów badanych nanokapsulek były wielościenne nanorurki węglowe (CNs). Kluczowym etapem w przygotowaniu pokryć było napełnianie nanorurek azotanem ceru (Rysunek 1). Pokrycia wytworzone z użyciem nanorurek napełnionych azotanem ceru zostały nałożone na stal pokrytą galwanicznie cynkiem oraz na aluminium. Wstępne pomiary odporności antykorozyjnej przeprowadzone metoda EIS wykazały korzystny wpływ azotanu ceru na odporność korozyjną wytworzonych pokryć.



Rus. 1. Obraz SEM nanorurek wypełnionych azotanem ceru. Obraz został wykonany w trybie "compo" (elektrony odbite). W tym trybie jasność obrazu jest proporcjonalna do  $z^2$ , gdzie  $z$  to liczba atomowa pierwiastka obecnego na powierzchni. Ponieważ cer ma liczbę atomową znacznie większą od węgla, obszary o dużym stężeniu ceru wydają się być jaśniejsze. Obraz świadczy o tym, że cer znajduje się głównie wewnątrz nanorurek.





#### 4. SMOOHS Smart Monitoring of Historic Structures

Projekt EC 7<sup>th</sup> FP 212939 SMOOHS (FRP) [2008-2011]  
(kierownik projektu: dr Michał Łukomski)

Głównym celem projektu jest opracowanie bezprzewodowego systemu monitorowania obiektów zabytkowych, który mógłby być używany przez konserwatorów w warunkach terenowych. System monitorowania będzie posiadał modułową strukturę tak, aby możliwe było wybranie systemów monitorujących i kombinacji czujników pod kątem odpowiedzi na specyficzne problemy związane z badanym obiektem.

Jednym z czujników, które będą użyte do monitorowania procesów zniszczenia obiektów zabytkowych jest czujnik emisji akustycznej. Zaprojektowanie układu do pomiaru emisji akustycznej umożliwiającego ciągle śledzenie procesów zachodzących w materiale, a jednocześnie zużywającego na tyle mało energii, aby pracować na zasilaniu bateryjnym przez okres do dwóch lat wymaga opracowania adekwatnej metodologii pomiarowej. Najważniejszym wyzwaniem jest zdefiniowanie charakterystyki sygnałów emisji akustycznej związanych z niszczeniem różnych, zabytkowych materiałów oraz opracowanie metody odseparowywania sygnałów związanych z procesami niszczącymi od środowiskowego szumu.

Podczas drugiego roku trwania projektu, główny nacisk położono na opracowanie optymalnego systemu detekcji emisji akustycznej, umożliwiającego prowadzenie długoterminowego monitoringu w środowiskach o wysokim poziomie szumu (elewacje budynków, obiekty eksponowane w muzeach). W takich przypadkach można oczekiwać bardzo niewielkiej ilości sygnałów w porównaniu do rejestrowanego szumu. Konieczne jest więc zastosowanie wyjątkowo efektywnego odfiltrowywania sygnałów niebędących wynikiem pęknięcia monitorowanego obiektu. Pomiar laboratoryjny pokazały, że nie istnieje jedna charakterystyczna częstotliwość sygnałów emisji akustycznej skorelowanych z mikrouszkodzeniem materiału. Sygnały, podczas przechodzenia przez materiał, ulegają osłabieniu, a ich mierzone częstotliwości są dodatkowo zaburzane przez zastosowane detektory i wzmacniacze. W tej sytuacji, zamiast pomiarów z użyciem wąskiego, dobrze zdefiniowanego okna częstotliwościowego, zdecydowano się na użycie wysoko-przepustowych filtrów w celu odcięcia niskoczęstotliwościowego tła. Tak skonstruowany system pomiarowy został przetestowany na materiale historycznym - prawie stuletnich drewnianych belkach wyjętych z konstrukcji dachowej Pałacu Malvezzi (1560) w Bolonii, Włochy. Przetestowano układy pomiarowe zbudowane w oparciu o różne detektory (szerokopasmowe: płaskie i wielorezonansowe oraz wąskopasmowe) i różne częstotliwościowe progi detekcji. Otrzymane wyniki pokazały, że filtrowanie częstotliwościowe znacząco poprawia stosunek sygnału do szumu i pozwala usunąć większość niepożądanych sygnałów zaciemniających wyniki monitoringu.

Opracowany system pomiarowy użyto również do śledzenia procesów zniszczenia wywoływanych przez przejścia fazowe oraz krystalizację soli. Pomiar wykonano w Laboratorium Rathgena w Berlinie (Niemcy) na próbkach pochodzących z Bramy Isztar (575 rok p.n.e., kolekcja Muzeum Pergamońskiego w Berlinie) zanieczyszczonych solami NaCl oraz Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Wyniki testów zostaną opracowane na początku przyszłego roku.

## 5. ROCARE Roman Cements for Architectural Restoration to New High Standards



Projekt EC 7<sup>th</sup> FP 226898 ROCARE (CP) [2009-2012]  
(kierownik projektu: prof. Roman Kozłowski)

Wysokohydrauliczne spoiwa, znane jako cementy naturalne lub romańskie, były materiałami do dekorowania elewacji budowli o kluczowym znaczeniu w XIX i na początku XX wieku - okresie gwałtownego rozwoju urbanistycznego w Europie. Poprzedni projekt UE ROCEM (2003-2006, koordynowany przez IKiFP PAN) przywrócił wytwarzanie cementów romańskich w skali pilotowej i zapoczątkował ich stosowanie w praktyce konserwatorskiej. Głównymi etapami nowego projektu ROCARE, realizowanego w latach 2009-2011, są: i) zwiększenie skali produkcji, ii) badania laboratoryjne służące pełnemu zrozumieniu optymalnych warunków przygotowania zapraw i ich stosowania w praktyce konserwatorskiej oraz iii) szerokie działania upowszechniające.

W okresie sprawozdawczym wyjaśniono szereg elementów mechanizmu spękań skurczowych zaczynów i zapraw romańskich, którego określenie jest głównym zadaniem badawczym Instytutu:

- skurcz związany ze schnięciem materiałów silnie zmniejsza się ze wzrostem zawartości kruszywa,
- skurcz związany ze schnięciem materiałów znacząco zwiększa się z wydłużaniem się czasu hydratacji próbki i związanej z postępującą hydratacją zmianą struktury porowatości,
- odkształcenie krytyczne, dla którego następuje pęknięcie materiałów w czasie rozciągania zwiększa się z czasem hydratacji,
- całkowity skurcz zaczynu i zaprawy o stosunku kruszywa do cementu 0,5 jest większy od krytycznego odkształcenia powodującego pęknięcie dla wszystkich czasów hydratacji,
- całkowity skurcz zaprawy o stosunku kruszywa do cementu 3,0 jest większy od krytycznego odkształcenia powodującego pęknięcie jedynie dla długich czasów hydratacji przekraczających 28 dni,
- w czasie szybkiego wysychania zaczynów spękania powierzchniowe znacznie osłabiają strukturę próbek,
- w czasie szybkiego wysychania zapraw bogatych w kruszywo i niskim skurczu nie obserwuje się powstawania spękań powierzchniowych, natomiast obserwuje się powolną relaksację naprężeń na drodze pełzania, co zwiększa odkształcenie krytyczne.

Instytut jest odpowiedzialny za realizację Pakietu Zadań 3 "Upowszechnianie i marketing". W okresie sprawozdawczym przygotowano wszystkie przewidziane planem zebrania i sprawozdania oraz zaplanowano działania w ramach tego Pakietu Zadań w kolejnym etapie projektu, w szczególności przygotowanie modelowych konserwacji elewacji w różnych krajach.



## 6. F3 Factory Flexible, Fast and Future Factory European Chemistry Consortium Begins the Journey into the Future of Production

EC 7<sup>th</sup> FP CP-IP 228867-2 F3 (IP) [2009-2013]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Wizją konsorcjum F3 jest wzmocnienie silnej, konkurencyjnej pozycji europejskiego przemysłu chemicznego poprzez stworzenie modułowych zakładów (zakłady F3), ściśle ze sobą współpracujących i działających w sposób ciągły, łączących w sobie wydajność zakładów pracujących w sposób ciągły na skalę światową, konsekwencję i wszechstronną skalowalność procesów jednostkowych (batchowych)

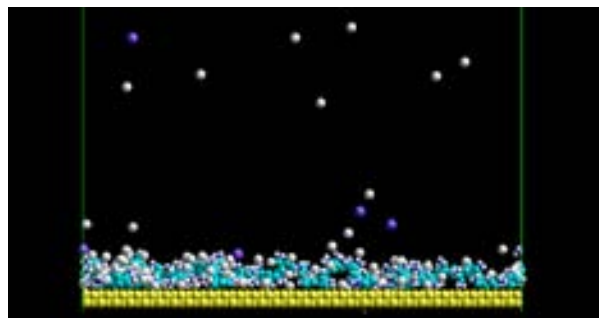
Projekt dostarczy radykalnych nowych sposobów produkcji opartych na:

- "Włącz i używaj" – technologii modułowej produkcji chemicznej, zdolnej do rozpowszechnienia w całym przemyśle chemicznym. Technologia ta używa znanej i powszechnie stosowanej wystandaryzowanej metody szybkiego sprzęgania blokowych modułów sprzętu (process equipment containers PEC). Pomieszczenie PEC, gdzie odbywa się proces montażu sprzętu (process equipment assemblies PEA) składa się ze wzmożonego wytwarzania sprzętu w celu szybkiej, elastycznej przyszłej produkcji chemicznej.
- Całościowa metodologia procesu projektowania stosuje pojęcia intensyfikacji procesu i innowacyjnych narzędzi decyzyjnych. To przyspieszy proces tworzenia i dostarczy znaczną redukcję zużycia energii, używania surowych materiałów i ograniczy wielkość zakładów.

Konsorcjum F3 wiodących akademickich i badawczych instytucji oraz 7 głównych kompanii przemysłowych produkujących syntetyczne produkty chemiczne ma 3 główne cele:

1. Udowodnić techniczną realność modelu produkcji F3 przez budowę i obsługę pokazowego zakładu produkującego od 0.1 do 30 kg/h produktu.
2. Udowodnić, że działanie zakładów F3 będzie bardziej ekonomiczne, eko-wydajne i bardziej zrównoważone niż konwencjonalny sposób produkcji w wielkoskalowych ciągłych lub mało- lub średnioskalowych produkcjach jednostkowych.
3. Zrobić krok w kierunku zmian w dostępnych technologiach europejskiej produkcji chemicznej oraz w kompaniach inżynierskich poprzez zaprojektowanie wydajniejszego sprzętu do prowadzenia reakcji chemicznych i rozpowszechnić standardy modułowych zakładów "włącz i używaj" oraz umożliwić szeroki dostęp do podstawowych urządzeń.

Głównym zadaniem IKiFP PAN w projekcie F3 jest modelowanie właściwości polielektrolitów i kopolimerów opartych na bazie kwasów poliakrylowych i określenie ich właściwości adsorpcyjnych oraz mechanizmu tworzenia przez nie cienkich filmów polimerowych, a także opracowanie podstaw naukowych zastosowania kopolimerów, produkowanych przez partnerów w projekcie, do enkapsulacji składników czynnych. Działanie to rozpoczęło się w 2010 roku. Wykonano wstępne symulacje adsorpcji łańcuchów polimerowych na powierzchniach jednorodnych. Przykładowy obraz uzyskany na podstawie symulacji ilustruje Rysunek 1.



Rys. 1. Przykładowy obraz symulacji adsorpcji polielektrolitu na jednorodnej powierzchni

## **PROJEKTY EU COST ACTION**



# 1. Molecular Structure-Performance Relationships at the Surface of Functional Materials



Projekt badawczy EU COST Action D36 [2006-2011]  
(reprezentant Polski: prof. Józef Korecki)

**Funkcjonalizacja warstwy granicznej bimetalicznych nanocząstek dla syntezy wysoko aktywnych i selektywnych katalizatorów; zrozumienie efektów synergicznych i promotora**  
(prof. Józef Korecki, dr Nika Spiridis, prof. Barbara Grzybowska-Świerkosz, dr hab. Ryszard Grabowski prof IKiFP PAN, mgr Jan Mizera, dr Robert Socha, mgr Ewa Zackiewicz)

Prowadzono badania modelowego bimetalicznego układu katalitycznego Au-Fe osadzanego na  $\text{TiO}_2(110)$ . Celem badań była analiza wpływu kolejności naporowania metali na dyspersję i morfologię oraz stany elektronowe nanocząstek bimetalicznych.

Prace badawcze prowadzono w układzie ultrawysokiej próżni (UHV) wyposażonym w naporowywarki metali typu tzw. celi Knudsen. Na powierzchni  $\text{TiO}_2(110)$  osadzono w temperaturze pokojowej  $0.25 \text{ \AA}$  Au oraz  $0.2 \text{ \AA}$  Fe zmieniając kolejność naporowania w poszczególnych eksperymentach. Otrzymane układy scharakteryzowano in situ technikami STM i XPS w zakresie temperatur 25-700°C.

Na podstawie analizy obrazów mikroskopowych stwierdzono, że w temperaturze pokojowej liczba klasterów w układzie  $\text{AuFe/TiO}_2$  (Fe naporowane jako pierwsze) jest ponad 3 razy większa w porównaniu do układu  $\text{FeAu/TiO}_2$ . Taka zależność sugeruje nukleację Au na wcześniej zaadsorbowanych niskowymiarowych i rozproszonych klasterach Fe. Wygrzewanie  $\text{AuFe/TiO}_2$  prowadzi do zmniejszania się liczby klasterów na skutek koalescencji cząstek Au oraz rozpuszczania się Fe w sieci  $\text{TiO}_2$ .

W przypadku układu  $\text{FeAu/TiO}_2$  zaobserwowano niewielki wpływ temperatury na liczbę klasterów, co sugeruje, że Au na  $\text{TiO}_2$  tworzy już w temperaturze pokojowej stabilny system. Fe osadzone na powierzchni Au, nie wpływa znacząco na liczbę klasterów na powierzchni  $\text{TiO}_2$ .

Analiza widm XPS wskazuje na występowanie maksimum dla zawartości Fe metalicznego oraz minimum dla  $\text{Fe}^{2+}$ . W przypadku układu  $\text{AuFe/TiO}_2$  wymienione maksimum dla Fe metalicznego i towarzyszące mu minimum  $\text{Fe}^{2+}$  występuje w ok. 50°C niższej temperaturze niż w przypadku układu  $\text{FeAu/TiO}_2$ . Układ  $\text{AuFe/TiO}_2$  wykazuje niższą zawartość powierzchniową Fe metalicznego oraz wyższą jonów  $\text{Fe}^{2+}$  w temperaturach w zakresie 25-150°C niż układ  $\text{FeAu/TiO}_2$ . W zakresie temperatur 300-500°C tendencja jest odwrotna. Powyżej 500°C skład powierzchni jest taki sam dla obydwu badanych układów.

Osadzanie Au na  $\text{Fe/TiO}_2$  powoduje zmniejszenie się intensywności sygnału pochodzącego od metalicznego Fe, co potwierdza nukleację Au na metalicznym Fe. Wynik ten jest zgodny ze zmianami energii wiązania elektronu (BE) dla wzbudzenia Au  $4f_{7/2}$  w układzie  $\text{AuFe/TiO}_2$ . Dla temperatur poniżej 300°C, wartość BE Au  $4f_{7/2}$  dla układu  $\text{Au/TiO}_2$  oraz  $\text{FeAu/TiO}_2$  sugeruje wpływ podkładki tj.  $\text{TiO}_2$  na stan elektronowy Au. W temperaturach powyżej 300°C, złoto uzyskuje podobny stan elektronowy w obydwu badanych układach.

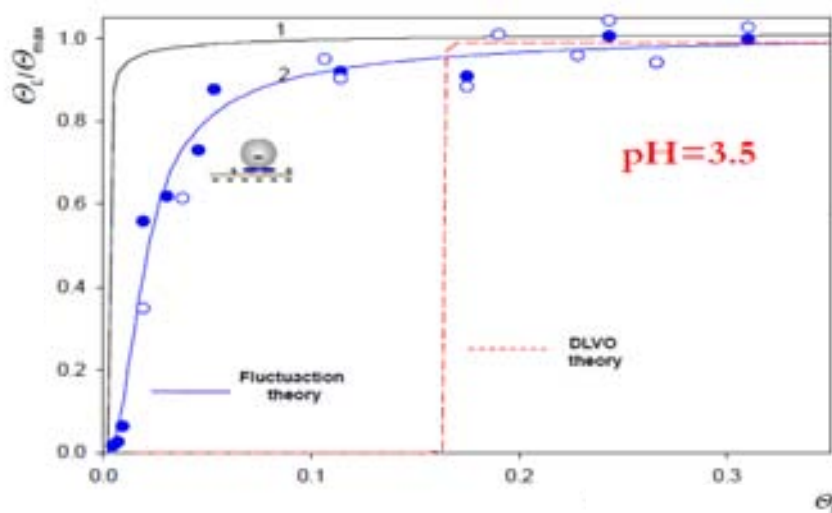
Przeprowadzone badania wskazują na istotny wpływ kolejności nakładania metali na dystrybucję bimetalicznych klasterów na powierzchni  $\text{TiO}_2$  oraz na stany elektronowe metali tworzących klaster. Przedstawione wyniki mogą sugerować drogę syntezy katalizatorów o zadanych właściwościach.

Projekt badawczy EU COST Action D43 [2006-2011]

(reprezentant Polski: prof. Zbigniew Adamczyk)

(wykonawcy: prof. Zbigniew Adamczyk, dr Małgorzata Nattich,  
mgr Monika Wasilewska, mgr M. Sadowska)

Na podstawie przeprowadzonych badań fizykochemicznych, rozwinięto dwie komplementarne metody wyznaczania śladowych ilości białek, charakteryzujące się znacznie większą precyzją, niż dotychczas stosowane metody chemiczne. Pierwsza z rozwiniętych przez nas metod opiera się na pomiarach potencjału przepływu dla powierzchni pokrytych monowarstewkami lub biwarstwami białek. Druga, metoda, opiera się na niespecyficznym (elektrostatycznym) lub specyficznym (wiązańia kowalencyjne) oddziaływaniach nośników koloidalnych (lateksów polistyrenowych) z białkami, tworzącymi warstewki powierzchniowe. Wskutek adsorpcji, lub chemisorpcji (w przypadku funkcjonalizowanych nośników) cząstek koloidalnych o określonej wielkości i ładunku powierzchniowym, pojawia się intensywny sygnał optyczny lub fluorescencyjny, który można w łatwy sposób analizować mikroskopowo. Precyzja tej metody, szczególnie w zakresie niskich stężeń białek jest bardzo wysoka, umożliwiając ich efektywną detekcję już dla stężeń ok. 0,01 ppm (10 ppb). Ponadto, wyznaczono przy pomocy tej metody, ładunek elektrokinetyczny (potencjał zeta) monowarstw białek w funkcji pH, a tym samym punkt izoelektryczny, co jest trudne przy użyciu metod objętościowych, wskutek agregacji białek. Przeprowadzono pomiary przy użyciu tej metody dla fibrynogenu. Uzyskaną w tych pomiarach zależność znormalizowanego pokrycia cząsteczek ujemnego lateksu L800,  $\Theta_L/\Theta_{max}$  od pokrycia fibrynogenu  $\Theta_f$  pokazano na Rysunku 1. Jak można zauważyć, pokrycie lateksu wzrasta gwałtownie ze wzrostem pokrycia fibrynogenu, osiągając wartości 0,8 już dla  $\Theta_f=0.05$  (5 %). Warto zauważyć, że wyniki doświadczalne opisywane są poprawnie rozwiniętą w ramach niniejszych badań teorią fluktuacji, natomiast często stosowana, klasyczna teoria DLVO (linia przerywana na Rysunku 1) nie stosuje się w tym przypadku, ze względu na heterogeniczność rozkładu ładunku elektrycznego.



Rys. 1. Zależność znormalizowanego pokrycia cząsteczek ujemnego lateksu L800,  $\Theta_L/\Theta_{max}$  od pokrycia fibrynogenu  $\Theta_f$ . Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane przy pomocy mikroskopii optycznej (•) oraz AFM (○), dla  $I=10^{-3}$  M, pH=3.5,  $n_b=1.77 \times 10^{10}$  cm<sup>-3</sup>, czas osadzania lateksu 20 godzin. Linie ciągłe 1-2 oznaczają wyniki obliczone na podstawie teorii fluktuacji rozwiniętej w ramach niniejszych badań przyjmując, że centrum adsorpcji składa się z jednej lub dwóch cząsteczek fibrynogenu. Linia przerywana oznacza wyniki przewidziane na podstawie teorii DLVO, przy założeniu ciągłego rozkładu ładunku na powierzchni międzyfazowej.

### 3. Wood Science for Conservation of Cultural Heritage



Projekt badawczy EU COST Action IE0601 [2006-2011]

(*representant Polski: prof. Roman Kozłowski*)

#### **Zarządzanie kolekcją muzealną w oparciu o komputerowe modelowanie wpływu wahań mikroklimatu na obiekty zabytkowe**

(*prof. Roman Kozłowski, dr Marcin Strojcki, mgr Bartosz Rachwał*)

Projekt dotyczy opracowania strategii zarządzania mikroklimatem dla kolekcji dzieł sztuki składających się z obiektów drewnianych. Partnerzy projektu - Muzea Narodowe w Krakowie i Warszawie są szczególnie zainteresowani optymalizacją kontroli mikroklimatu w pomieszczeniach ekspozycyjnych oraz magazynach, ponieważ posiadają najbardziej znaczące w Polsce kolekcje sztuki średniowiecznej i nowożytnej, zawierające polichromowane drewno. Podstawowym celem projektu jest opracowanie strategii zarządzania mikroklimatem, która z jednej strony obniży koszty, a z drugiej zapewni skuteczną ochronę zabytkowych obiektów.

Realizacja tego celu wymaga naukowej oceny wpływu wahań parametrów mikroklimatycznych na proces niszczenia obiektów zabytkowych. Podstawowymi narzędziami służącymi do osiągnięcia tego celu będą symulacje komputerowe, wsparte pomiarami fizycznych właściwości materiałów oraz monitorowaniem postępu mikrozniszczeń zachodzących w obiektach poddanych wahaniom temperatury i wilgotności względnej.

W okresie sprawozdawczym opracowano podstawowe narzędzie badawcze - zastosowano metodę elementów skończonych do modelowania transportu wilgoci, odkształceń i naprężeń w obrazach na desce oraz polichromowanych rzeźbach, w odpowiedzi na zmieniające się warunki klimatyczne. Kluczową cechą przyjętego podejścia jest powiązanie dyfuzji pary wodnej z metodą elementów skończonych, co pozwala na dokładną analizę odpowiedzi obiektów zabytkowych w czasie rzeczywistym. Oprócz precyzyjnego opracowania modelu od strony matematycznej, określono doświadczalnie właściwości materiałów budujących drewno polichromowane takie jak sorpcję pary wodnej, wilgotnościowe pęcznienie i skurcz, współczynniki dyfuzji i emisji powierzchniowej pary wodnej, oraz właściwości mechaniczne podczas rozciągania. Dokładność modelu zweryfikowano przez porównanie odkształceń wyliczonych ze zmierzonymi odkształceniami obiektów wystawionych w rzeczywistych warunkach muzealnych.

Opracowana metoda posłużyła do wyznaczenia ważnych parametrów odpowiedzi drewnianego podłoża obrazów tablicowych na zmieniające się warunki klimatyczne. Dla środkowego zakresu wilgotności względnej, wyznaczono krytyczne amplitudy cyklicznych sinusoidalnych fluktuacji wilgotności względnej wywołujących odkształcenia 0.002 w najsilniej odpowiadającym kierunku styczonym podłoża drewnianego, które warstwa malarska wytrzyma bez uszkodzenia, w funkcji czasu trwania cyklu, grubości deski i konfiguracji dyfuzji. Ustalono, że obrazy na desce nie odpowiadają znacząco na fluktuacje dzienne lub krótsze. Deski odpowiadają coraz znacznie, kiedy czas trwania fluktuacji rośnie, tak że wywołuje ona pełną odpowiedź deski na każdy cykl. Czasy te wynoszą 14 i 90 dni w 20°C dla deski o grubości odpowiednio 10 i 40 mm, z obydwoma powierzchniami otwartymi dyfuzyjnie. Amplituda krytyczna fluktuacji wilgotności względnej prowadzącej do pełnej odpowiedzi drewna wynosi  $\pm 6\%$ .

Zaawansowano również modelowanie numeryczne transportu wilgoci i odkształceń dla złożonego układu drewna pokrytego warstwą zaprawy malarskiej.



## 4. Physics of Droplets

Projekt badawczy EU COST Action P21 [2006-2010]  
(reprezentant Polski: prof. Kazimierz Małyśa)

Projekt COST P21 "Physics of Droplets" został zakończony 3 października 2010 (rozpoczął się 4.10.2006 r). W projekcie tym uczestniczyło 27 zespołów z różnych instytucji badawczych z 17 krajów europejskich oraz z Australii (Ian Wark Research Institute of University of South Australia, Adelaide). Z Polski w pracach tego projektu brały udział zespoły badawcze z IkiFP PAN, Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN oraz Wydziału Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej, a prof. K. Małyśa z IkiFP PAN był polskim przedstawicielem w Management Committee. Profesor N.Vandewalle z Université de Liège, Institut de Physique, GRASP, Liège koordynował prace tego projektu.

W 2010 roku odbyło się spotkanie Management Committee (MC) w Borovets. Spotkanie to było połączone ze spotkaniami Grup Roboczych WG1, WG2 oraz WG3, które miało miejsce w dniach 14-16.07.2010 r. Na tej konferencji został przedstawiony referat: J. Zawala, D. Terwagne, S. Dorbolo, N. Vandewalle, K. Małyśa, "On Mechanism of the Bubble and Droplet Bouncing from the Liquid/gas Interface", będący wynikiem nawiązanej w ramach projektu COST P21 współpracy naukowej z Université de Liège, Institut de Physique, GRASP, Liège, oraz przedstawiony poster: D. Kosior, J. Zawala, M. Krasowska, K. Małyśa, "Air at Hydrophobic Surfaces and the Three-Phase Contact Formation". W tabeli poniżej zestawione są informacje dotyczące liczby konferencji grup roboczych (WG), spotkań MC, zorganizowanych "training school" (TS), oraz odbytych STSM w poszczególnych latach trwania akcji COST P21.

Year	WG1	WG2	WG3	MC	TS	STSM
2006	1	1	1	2	0	5
2007	2	2	1	2	0	7
2008	1	1	2	2	1	5
2009	2	2	2	2	0	24
2010	1	1	1	1	1	3
<b>TOTAL</b>	<b>7</b>	<b>7</b>	<b>7</b>	<b>9</b>	<b>2</b>	<b>44</b>

Mgr inż. A. Niecikowska z IkiFP PAN aplikowała i otrzymała w 2010 fundusze na wyjazd naukowy w ramach tzw. Short Term Scientific Mission (STSM) do Australii, gdzie przebywała w okresie 29.01-16.02.2010 r. W trakcie tego pobytu uczestniczyła w dniach 1.02-5.02.2010 w 27<sup>th</sup> Australian Colloid & Surface Science Student Conference, na której przedstawiła referat: A. Niecikowska, M. Krasowska, J. Ralston, K. Małyśa, "Mutual Interdependences of Electrostatic Interactions and Hydrophobicity for Three Phase Contact Formation at Titania Surface". Po konferencji mgr inż. A. Niecikowska przebywała w Ian Wark Research Institute of University of South Australia, Adelaide, gdzie wykonywała badania związane z realizacją wspólnej pracy dotyczącej otrzymywania i wpływu modyfikacji powierzchni filmów TiO<sub>2</sub> na powstawanie kontaktu trójfazowego roztwór/gaz/TiO<sub>2</sub> i na stabilność filmów ciekłych powstających w trakcie kolizji pęcherzyków gazowych z powierzchnią TiO<sub>2</sub>.

### **Dynamika oddziaływań poruszających się mikroobiektów (cząstki, kropelki, pęcherzyki) z powierzchniami międzyfazowymi**

Projekt został zakończony 29 października 2010. Miał on na celu uzyskanie nowych danych, które pogłębią wiedzę o zjawiskach związanych z tworzeniem, ruchem i oddziaływaniami pomiędzy mikroobiektami (kropelki, cząstki, pęcherzyki) i różnymi powierzchniami międzyfazowymi o modyfikowanych właściwościach powierzchniowych, a także o roli cienkich

filmów ciekłych w procesach koalescencji, osadzania i powstawania kontaktu trójfazowego. Projekt był realizowany przez grupy badawcze z trzech polskich jednostek naukowych, a mianowicie: i) Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN (koordynator projektu), ii) Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, iii) Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej i we współpracy z zespołami badawczymi z różnych krajów Unii Europejskiej oraz Australii, będących członkami projektu COST P21 "Physics of Droplets".

Wyniki uzyskane w trakcie realizacji tego projektu badawczego zostały przedstawione w 32 publikacjach, 45 referatach i posterach na międzynarodowych konferencjach i spotkaniach grup roboczych COST Action P21 "Physics of Droplets". W trakcie realizacji projektu uaktywniono istniejące oraz nawiązano nowe kontakty międzynarodowe i rozwinięto międzynarodową współpracę naukową. Wymiernymi efektami tej międzynarodowej współpracy naukowej są: i) wspólne publikacje, ii) wspólne referaty i/lub postery na międzynarodowych konferencjach, iii) wymiana naukowa i badania wykonywane we współpracujących jednostkach, iv) projekty dalszych wspólnych badań (np. IKiFP PAN i GRASP University of Liege w Belgii, IKiFP PAN i IWRI University of Adelaide w Australii, IPPT PAN i Institute of Fluid Mechanics and Heat Transfer, Graz University w Austrii, IPPT PAN i Physics of Complex Fluids, University of Twente w Holandii).

Teoretyczne i doświadczalne badania przeprowadzone w oparciu o wykorzystanie komplementarnych możliwości badawczych oferowanych przez jednostki realizujące projekt pozwoliły uzyskać szereg nowych wyników związanych z mechanizmami oddziaływania mikroobiektów z różnymi powierzchniami międzyfazowymi. Uzyskane wyniki teoretyczne i doświadczalne mają zarówno znaczenie podstawowe, istotnie poszerzając aktualny stan wiedzy na temat dynamiki przepływu cząstek, kropeł i pęcherzyków, jak i praktyczne - dostarczając danych ilościowych niezbędnych do opracowania bardziej efektywnych procesów separacji w układach wielofazowych, jak również zoptymalizowania metod dostarczania leków aerozolowych do układu oddechowego przez inhalację. Dzięki zastosowaniu różnorodnego podejścia do rozważanych zagadnień oraz unikatowych metod badawczych będących w dyspozycji poszczególnych jednostek realizujących projekt oraz rozwiniętej współpracy międzynarodowej, możliwe było wieloaspektowe ujęcie problematyki ruchu i oddziaływań poruszających się mikroobiektów. Wszystkie zaplanowane zadania badawcze zostały wykonane i w trakcie realizacji projektu została pogłębiona istniejąca współpraca naukowa i rozwinięta współpraca z wieloma zagranicznymi ośrodkami naukowymi.



**PROJEKTY EUROPEJSKIEGO  
OBSZARU GOSPODARCZEGO**



# 1. Effective Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment



Projekt badawczy EEA PL0084 NOMRemove [2007-2010]  
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Projekt realizowany był w okresie od 1 lipca 2007 do 30 czerwca 2010 roku, przez konsorcjum naukowe utworzone przez dwóch partnerów: IKiFP PAN oraz The Foundation for Scientific and Industrial Research at the Norwegian Institute of Technology, SINTEF - Material Science and Chemistry, Oslo.

Celem ogólnym projektu było opracowanie metodyki pozwalającej na ulepszenie stosowanych do tej pory technik uzdatniania wody pitnej poprzez efektywne usuwanie rozpuszczonych naturalnych substancji organicznych (NSO) w celu osiągnięcia standardów zgodnie z Dyrektywą 98/83/EC o jakości wody pitnej. Cel ten osiągnięto dla modelowych wodnych roztworów NSO. Fotokataliza heterogeniczna jest oszczędną i bezpieczną dla środowiska technologią zaawansowanego utleniania, w celu usunięcia organicznych zanieczyszczeń z wody, dlatego badania Instytutu w projekcie koncentrowały się wokół tego procesu. Uzyskano kilka rodzajów modyfikowanych fotokatalizatorów  $\text{TiO}_2$  o różnej aktywności w reakcji rozkładu modelowych substancji organicznych. Fotokatalizatory te były głównie testowane w układzie złoża fluidalnego. Sprawdzono kilka utleniaczy chemicznych, które mogą działać równocześnie z fotokatalizatorem pod kątem zwiększenia wydajności reakcji rozkładu kwasu humusowego. Najbardziej efektywny okazał się być nadsiarczan sodu, który następnie był zamykany w porowatych kapsułkach krzemionkowych. Kapsułki te modyfikowano warstwami polielektrolitów, aby spowolnić wypływ utleniacza w czasie i zapewnić długotrwały efekt synergistyczny. Zaprojektowano membrany fotokatalityczne o różnej geometrii (oczyszczana woda przepływa przez pory membrany *ang. Flow through* (Ft), lub ponad membraną *ang. Flow over* (Fo) w układzie tzw. kontaktora *ang. Contactor*). W IKiFP PAN zmontowano urządzenie do oczyszczania wody w skali laboratoryjnej (Rysunek 1a). Zastosowany w nim wymienny moduł pozwala na pracę urządzenia z fotokatalitycznymi membranami filtracyjnymi jak i w układzie złoża fluidalnego. W laboratoriach partnera norweskiego powstały urządzenia testujące membrany o różnych geometriach (Rysunek 1b i 1c). Opracowano dwie metody oczyszczania wody bazujące na fotokatalitycznych membranach filtracyjnych i złożu fluidalnym, które pozwalają na usuwanie, z roztworów wodnych, 98 % modelowej substancji organicznej – soli sodowej kwasu humusowego. Osiągnięcie wymaganej całkowitej mineralizacji zanieczyszczeń humusowych w wodach naturalnych wymaga kontynuacji badań po zakończeniu projektu.



Rys. 1. Urządzenia zaprojektowane i wytworzone w skali laboratoryjnej w ramach projektu PL0084: a) urządzenie do oczyszczania wody z wymiennym modulem do pracy z fotokatalitycznymi membranami filtracyjnymi i w układzie złoża fluidalnego, b) urządzenie do testowania membran płaskich, c) urządzenie do testowania membran tubularnych

## 2. Establishing Standards for Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood

Projekt badawczy EEA PL0084 [2007-2010]  
(kierownik projektu: *prof. Roman Kozłowski*)

Malarstwo tablicowe na drewnie, polichromowana rzeźba drewniana oraz malowidła ściennie dekorujące wnętrza zabytków architektury drewnianej stanowią znaczącą część spuścizny artystycznej. Ochrona tego dziedzictwa jest szczególnie ważna dla Polski i Norwegii, które posiadają unikatowy w skali światowej zespół polichromowanych drewnianych kościołów. Najcenniejsze z nich są wpisane na Listę Dziedzictwa UNESCO.

Do najpoważniejszych zagrożeń polichromii na drewnie należą niekontrolowane fluktuacje parametrów powietrza w ich otoczeniu, prowadzące do deformacji i uszkodzeń mechanicznych drewna, warstwy zaprawy i powłoki malarskiej. Głównym celem projektu było precyzyjne i ilościowe ustalenie wielkości fluktuacji parametrów powietrza bezpiecznych dla drewnianych powierzchni polichromowanych. W kwietniu 2009 zakończono jego realizację.

W okresie ostatnich miesięcy realizacji projektu wykonano ostatnie zadanie badawcze polegające na pomiarze pola lokalnej odpowiedzi metrycznej drewna na przyłożoną siłę i na adsorpcję pary wodnej z otoczenia. Pomiarzy wykonano na Politechnice w Eindhoven w Holandii przy użyciu interferometru plamkowego mierzącego odkształcenia prostopadle do osi optycznej. Pomiarzy wykazały, że minimalna i maksymalna wartość lokalnego odkształcenia drewna jest taka sama w teście mechanicznym i wilgotnościowym, co oznacza, że mechaniczne symulowanie procesów zmęzeniowych jest procedurą prawidłową z punktu widzenia mechaniki uszkodzania warstwy dekoracyjnej wywołanego bodźcami klimatycznymi.

W ramach upowszechniania wyników projektu zorganizowano międzynarodowy warsztat projektu w Oslo oraz krajowy warsztat w Warszawie. Współorganizatorami warsztatu międzynarodowego byli partner norweski projektu Instytut Badań nad Dziedzictwem Kultury NIKU w Oslo oraz Akcja COST IE0601 "Wood Science for Conservation of Cultural Heritage". W warsztacie wzięło udział 70 uczestników z Europy i USA. Warsztat krajowy zorganizowano we współpracy z Mazowieckim Wojewódzkim Konserwatorem Zabytków. W warsztacie wzięło udział około 100 uczestników.

Ważnym środkiem rozpowszechniania wiedzy o ochronie polichromowanego drewna jest broszura przygotowana przez zespół realizujący, wydrukowana w nakładzie 1500 egz. Zawiera ona informacje o mikroklimacie budowli zabytkowych, zagrożeniach drewna polichromowanego, strategiach ochrony, międzynarodowych wytycznych i normach. Broszurę otrzymali uczestnicy warsztatu krajowego w Warszawie. Rozesłano ją również do biur wojewódzkich konserwatorów zabytków w całej Polsce.

Wszystkie publikacje powstałe w wyniku realizacji projektu, prezentacje ustne i postery z obydwu warsztatów oraz broszurę udostępniono w formie elektronicznej na stronie internetowej projektu. Cieszą się one dużym zainteresowaniem w krajowym i międzynarodowym środowisku konserwatorskim.

## **INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE**



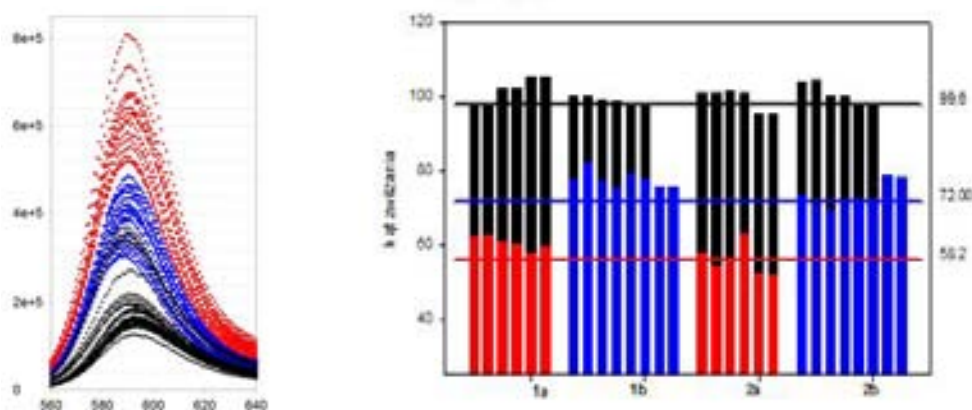


# 1. Enzymes as Nanotools – Development of a New, Enzyme-Based Technology for Engineering Selectively Preamable, Nano-Structured Membranes

Projekt badawczy GDRE Francja 1206/GDR/2007/03 Enzymes as Nanotools [2007-2010]  
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Celem zakończonem w tym roku projektu było zdobycie niezbędnej wiedzy pozwalającej na zastosowanie enzymów jako "nanonarzędzi" do otrzymywania nowych materiałów biomedycznych o nanostrukturze powierzchniowej lub sensorów biomedycznych. Badania koncentrowały się na określeniu wpływu reakcji enzymatycznej na strukturę i właściwości fizykochemiczne warstw fosfolipidowych na swobodnej powierzchni i naniesionych na podkładki stałe..

Wykorzystywanym enzymem była fosfolipaza A2 (PLA2), która selektywnie odcina kwasy tłuszczowe znajdujące się przy drugim węglu glicerolu w fosfolipidach, a do prawidłowego działania wymaga obecności jonów wapnia. Produktem tej reakcji jest kwas tłuszczowy, który w zależności od długości łańcucha hydrofobowego jest rozpuszczalny lub nierozpuszczalny w wodzie. Do badań zastosowano cały szereg metod eksperymentalnych. Przykładowo płytkę pokrytą fosfolipidami (1 % stanowiły fosfolipidy ze znakowaną fluorescencyjnie "głową") przed reakcją enzymatyczną i po reakcji badano za pomocą spektrofluorymetrii korelując wyniki z pomiarami kąta zwilżania (Rysunek 1). Pomiary zwilżalności wykazały wzrost hydrofilowości związany z odcięciem części łańcuchów hydrofobowych i wzrost intensywności fluorescencji.



Rys. 1. Zależność intensywności fluorescencji i kątów zwilżania od sposobu potraktowania płytki z naniesionym fosfolipidom. Kolor czarny – suche płytki z naniesionymi fosfolipidami 1% DPPE-Rod 99% DLPE, kolor czerwony – płytki po działaniu enzymu, niebieski- płytki zanurzone jedynie w roztworze chlorku wapnia.

Wykonano również pomiary adsorpcji i ubytku masy po reakcji enzymatycznej za pomocą mikrowagi kwarcowej (QCM). W tych doświadczeniach warstwy fosfolipidowe były nakładane na kryształy kwarcowe z napyłowaną warstwą złota w sposób nieuporządkowany z roztworu chloroformu i za pomocą techniki L-B. Analiza otrzymanych wyników wykazała, że enzym ulega adsorpcji na powierzchni warstwy fosfolipidowej (obserwowany przyrost masy), po czym, po krótkim etapie równowagi obserwujemy ubytek masy, zwłaszcza w fazie płukania. Przebieg reakcji enzymatycznej badano także mierząc prędkości lokalne i graniczne pęcherzyka gazu wznoszącego się w szklanej kolumnie, które obniżały się w miarę pojawiania się rozpuszczalnego w wodzie produktu reakcji - kwasu dodekanowego. Ponadto kinetykę przebiegu reakcji enzymatycznej dla warstwy fosfolipidowej na swobodnej powierzchni badano mierząc zmiany potencjału powierzchniowego metodą wibrującej elektrody.

### 3. Monowarstwy Fe/W(110): adsorpcja i magnetyzm

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Austrii [2009-2011]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

#### Adsorpcja tlenu na powierzchni Fe(110)

Badania adsorpcji tlenu na żelazie są niezwykle istotne ze względu na znaczenie tego zjawiska dla procesów takich jak utlenianie, pasywacja, korozja i kataliza. Zgodnie z licznymi doniesieniami literaturowymi tlen na powierzchni żelaza (110) adsorbowany jest dysocjatywnie z prekursora dyfundującego po podłożu Fe. Jednakże pomimo licznych prac dotyczących tej tematyki wyniki pomiarów są fragmentaryczne a często wręcz ze sobą sprzeczne. W ramach projektu adsorbowano tlen na Fe(110)/W(110) w temperaturze pokojowej. Dyfrakcja elektronów nisko energetycznych (LEED) była używana do zidentyfikowania symetrii nadstruktury adsorbatu. Znaleziono trzy wyraźne, dobrze zdefiniowane struktury: dobrze znaną 2x2 (przy ekspozycji 3 L), tak zwaną „split 3x1” (przy ekspozycji 17 L) oraz nową, według nas dotychczas nie odnotowywaną w literaturze 3x2. Za pomocą jądrowego rezonansowego rozpraszania (NRS) promieniowania synchrotronowego w ośrodku ESRF Grenoble (wiązka ID 18) badano także modyfikację struktury elektronowej żelaza wywołaną adsorpcją tlenu.

Adsorpcja tlenu na powierzchni litego Fe(110) porównywana była z wynikami uzyskanymi dla adsorpcji na monowarstwie Fe/W(110). Za pomocą uzupełniających się pomiarów LEED, AES i STM zidentyfikowano struktury adsorpcyjne odpowiadające różnym stadiom adsorpcji. Dodatkowo, przy użyciu NRS i CEMS zaobserwowano wyraźną zmianę struktury elektronowej przy ekspozycji ok. 100 L, którą zinterpretowano jako początkowe stadium tworzenia się fazy tlenkowej. Różnice reaktywności powierzchni Fe(110) i monowarstwy Fe/W(110) zinterpretowano jako wywołane przez rozciągnięcie sieci Fe oraz wpływ podłoża wolframowego.

#### Reorientacja spinowa w monowarstwach Fe/W(110)

Przy pomocy jądrowego rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (NRS) badano szczegółowo reorientację spinową (SRT) w ultracienkich warstwach Fe/W(110) spowodowaną zmianą grubości warstwy. Podczas przejścia SRT kierunek osi łatwej namagnesowania zmienia się od kierunku [110], prostopadłego do warstwy, do kierunku [1-10], w płaszczyźnie warstwy. Niezwykle szybka akwizycja widm NRS, w połączeniu z wysoką czułością tej metody na orientację magnetycznego pola nadsubtelnego pozwoliła na określenie konfiguracji magnetycznej podczas przejścia SRT dla czystej powierzchni, niezaburzonej adsorpcją gazów reszkowych. Przeprowadzone badania wskazały na niekolinearną strukturę magnetyczną wynikającą prawdopodobnie z oddziaływań wymiennych oraz dipolowych pomiędzy obszarami jedno-, dwu- i trój-warstwowymi współlistniejącymi w wyniku odchylenia od wzrostu typu warstwa po warstwie. Zaobserwowano także niezwykle interesującą właściwość polegającą na prostopadłym namagnesowaniu w obszarach dwu-warstw w temperaturze 300 K. Uzyskane profile namagnesowania w kierunku prostopadłym do powierzchni były do tej pory niedostępne innymi metodami.

#### **4. Epitaksjalne nanostruktury, metaliczne i tlenkowe, badane przy pomocy jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego**

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Francji Program POLONIUM

[2010-2011]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Ultracienki tlenek FeO(111) nanoszono na powierzchnię monokryształu Pt(111). Najlepsze struktury FeO uzyskiwano przez utlenianie pojedynczych monowarstw żelaza w ekspozycji 2 L przy ciśnieniu parcjalnemu tlenu  $5 \times 10^{-8}$  mbar i temperaturze podłoża 280°C, a następnie wygrzewaniu w UHV w temperaturze 600°C. W przeciwieństwie do wcześniejszych doniesień literaturowych mówiących o stabilności warstwy tlenku tylko do 2.5 ML w naszych badaniach stabilne FeO można było uzyskać dla wielu monowarstwowych cykli.

Badania LEED i STM powierzchni FeO świadczą o dobrym uporządkowaniu strukturalnym tlenku. Dla warstw FeO zaobserwowano wzrost typu warstwa po warstwie. Charakterystyczną cechą powierzchni FeO była obecność nadstruktury Moire pojawiającej się na skutek dużej różnicy w stałych sieci (11%) FeO(111) i podłoża Pt(111). Badania CEMS przeprowadzone w szerokim zakresie grubości warstwy tlenku i temperatury wykazały dalekozasięgowe uporządkowanie magnetyczne w warstwach FeO o grubości kilku angstromów.

W grudniu 2010 przeprowadzono także pomiary jądrowego rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (w ESRF Grenoble) na warstwach tlenku FeO/Pt(111), mierząc zarówno widma czasowe jak i fononowe. Wyniki pomiarów wskazują na istotną korelację pomiędzy właściwościami magnetycznymi dwuwymiarowego tlenku a jego strukturą krystaliczną, ale ich dokładniejsza analiza planowana jest w kolejnej fazie realizacji projektu.

Współpraca z ośrodkiem synchrotronowym ESRF w Grenoble trwa już wiele lat, także w tematyce projektu Polonium wspólne badania wyprzedziły ich finansowanie ze strony polskiej, co zaowocowało publikacją T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Zając, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, . Matlak, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Partyka-Jankowska, M. Rennhofer, A. I. Chumakov, S. Stankov, R. Ruffer, J. Korecki, "Non-collinear Magnetization Structure at the Thickness Driven Spin Reorientation Transition in Epitaxial Fe Films on W(110)", Phys. Rev. Lett., 105 (2010) 027206.



## **PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE**



## 1. MPD Krakow Interdisciplinary PhD Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures



PO IG 1.1.2. [2008-2012] MPD

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Projekt MPD "Krakow Interdisciplinary PhD Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures" jest realizowany w ramach Międzynarodowych Projektów Doktoranckich (MPD) koordynowanych przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej i finansowanych w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka. Projekt jest koordynowany przez dr hab. Bartłomieja Szafrana z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, który jest partnerem w projekcie. W projekcie uczestniczą również jednostki zagraniczne: Universiteit Antwerpen (Belgia), University of Leeds (Wielka Brytania), National Research Centre INFM-CNR (Włochy), University of Stockholm (Szwecja), Max Plank Institute für Molekulare Pflanzenphysiologie (Niemcy), Max Plank Instytut für Kolloid und Grenzflächenforschung (Niemcy), Basque Country University (Hiszpania), SINTEF Material Chemistry (Norwegia), VŠB-Technical University of Ostrava (Czechy), Institute of Physical Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences (Bułgaria).

Pięcioletni projekt jest realizowany od 1 listopada 2008, a jego celem jest zrealizowanie 12 prac doktorskich w ramach 12 indywidualnych projektów naukowych. Rekrutacja doktorantów odbyła się w drodze otwartych konkursów. W 2009 proces rekrutacji został zakończony i obecnie w IkiFP PAN jest realizowanych 5 projektów doktoranckich w następujących tematach:

1. mgr A. Wójcik (promotor: dr hab T. Borowski. prof. IkiFP PAN) "Computer Modeling of Biological Nanostructures",
2. mgr inż. M. Adamczak (promotor: prof. P. Warszyński) "Surfactants, Polyelectrolytes and Nanoparticles as Building Blocks for Surface Nanostructures",
3. mgr inż. D. Kosior (promotor: prof. K. Małyśa) "Nanostructures and Stability of Thin Liquid Layers",
4. mgr inż. K. Luberda-Durdaś (promotor: prof. W. Łasocha) "Hybrid Organic-Inorganic Layered Materials - Precursors of Semiconducting Nanostructures",
5. mgr inż. E. Młyńczak (promotor: prof. J. Korecki) "Surface and Interface Properties of Metal-Oxide Magnetic Nanostructures".



## **2. ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości**

PO KL 4.1.1. [2009-2015] ISD

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Projekt jest realizowany w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki. Projekt jest koordynowany przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH i jest realizowany w partnerstwie z IKiFP PAN i Instytutem Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie.

Celem studiów doktoranckich jest wykształcenie specjalistów ze stopniem doktora w dziedzinach, które uznane zostały za strategiczne w Unii Europejskiej i określonych są kryptonimami: Info, Bio, Nano, Techno. Kształcenie i badania naukowe realizowane w ramach ISD obejmują fizyczne, chemiczne i technologiczne aspekty nauki o materiałach oraz nowoczesnej energetyki.

Projekt realizowany jest od 2009 roku. W chwili obecnej naukę w jednostkach partnerskich rozpoczęły dwa roczniki (po 24 osoby każdy). W IKiFP PAN realizowanych jest 14 prac doktorskich:

I nabór w 2009 roku:

1. mgr M. Nosek (promotor: dr hab. P. Weroński prof. IKiFP PAN) „Analiza porowatości wielowarstwowych materiałów koloidalnych o kontrolowanej architekturze”
2. mgr A. Pajor (promotor: prof. P. Warszyński) „Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami”
3. mgr M. Krzak (promotor: prof. IKiFP PAN P. Nowak) „Wysokosprawne pokrycia antykorozyjne z materiałów kompozytowych na osnowie polimerów organicznych”
4. mgr M. Oćwieja (promotor: prof. Z. Adamczyk) „Nowe materiały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności zawierające nanocząstki srebra - zastosowanie biomedyczne”
5. mgr J. Dziedzic (promotor: prof. P. Warszyński) „Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami”
6. mgr K. Onik (promotor: dr hab. M. Derewiński prof. IKiFP PAN) „Nowe materiały hierarchiczne oparte na nanoklastkach zeolitów jako podstawa nowoczesnych układów katalitycznych”

II nabór w 2010 roku:

7. mgr P. Batys (promotor: dr hab. P. Weroński prof. IKiFP PAN) „Wieloskalowe modelowanie nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchni międzyfazowej ciecz/ciało stałe”
8. mgr A. Dobija (promotor: prof. W. Łasocha) „Nowe materiały perokso- i polimetalanowe dla potrzeb katalizy, medycyny i nowych technologii”
9. mgr A. Dziedzicka (promotor: prof. B. Sulikowski) „Właściwości fizykochemiczne multiporowatych sit molekularnych”
10. mgr M. Grzesiak (promotor: prof. W. Łasocha) „Metalloorganiczne struktury MOF - materiały dla katalizy, inżynierii krystalicznej i "zasobniki gazów”
11. mgr Ż. Kalemba (promotor: dr hab. A. Drelinkiewicz prof. IKiFP PAN) „Badania na doborem katalizatorów dla reakcji eteryfikacji gliceryny”
12. mgr A. Miłaczewska (promotor: dr hab. T. Borowski prof. IKiFP PAN) „Modelowanie molekularne struktury i aktywności katalitycznej materiałów biologicznych”
13. mgr D. Szepietowska (promotor: prof. B. Sulikowski) „Właściwości fizykochemiczne katalizatorów hybrydowych zawierających sole wybranych heteropolikwasów”
14. mgr M. Tatko (promotor: dr hab. P. Nowak prof. IKiFP PAN) „Nowe materiały na osnowie tlenków ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych stałotlenkowych ogniwach paliwowych”

### 3. SPINALB Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do zastosowań w elektronice spinowej



PO IG .2. 2. [2009-2011] SPINLAB  
(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

W ramach zadania nr 12 "Przystosowanie pomieszczeń laboratoryjnych Laboratorium Powierzchni i Nanostruktur do potrzeb mikroskopu PEEM-LEEM" przeprowadzono prace adaptacyjne pomieszczenia laboratoryjnego na potrzeby mikroskopu PEEM-LEEM. Adoptowana powierzchnia wynosi 38 m<sup>2</sup>. Pomieszczenie wyposażano w niezbędne instalacje:

- elektryczną, teletechniczną oraz przeciwpożarową
- wentylacyjną oraz klimatyzacyjną,
- sprężonego powietrza

Laboratorium wyposażono w infrastrukturę komputerową oraz zestaw mebli laboratoryjnych. Zadanie zostało zakończone.

W ramach zadania nr 13 "Zakup mikroskopu PEEM-LEEM" w roku 2010 podjęto następujące działania:

- Przygotowanie do przetargu:
  - wizyty w firmach produkujących mikroskopy LEEM-PEEM: ELMITEC w Clausthal-Zellerfeld oraz SPECS w Berlinie;
  - przygotowanie, na podstawie zebranych informacji, specyfikacji do przetargu;
- Ogłoszenie przetargu na mikroskop PEEM-LEEM oraz komorę preparacyjną.
- Rozstrzygnięcie przetargu - podpisanie umowy z firmą ELMITEC na zakup tych układów.

Ponadto podjęto działania przygotowawcze do realizacji kolejnych etapów projektu, czyli:

- przeprowadzenia szkoleń z zakresu obsługi mikroskopu w warunkach synchrotronu
- uruchomienia oraz testowania zakupionego mikroskopu przy synchrotronie.

Działania przygotowawcze mają na celu znalezienie optymalnego miejsca przy jednym z europejskich synchrotronów. Dotąd przeprowadzono rozmowy oraz przedstawiono projekt współpracy w następujących synchrotronach:

- MAX-lab, Lund
- ESRF, Grenoble
- Elettra, Trieste

W ramach zadania 13 podjęto następujące działania promocyjne:

- Wykonanie zewnętrznej tablicy promocyjno-informacyjnej na temat projektu SPINLAB i umieszczenie jej przed budynkiem IKiFP PAN.
- Zamieszczenie na stronie internetowej IKiFP PAN informacji na temat uczestnictwa w projekcie SPINLAB.
- Prezentacja posteru dotyczącego projektu SPINLAB oraz mikroskopu PEEM-LEEM na konferencji 10<sup>th</sup> International School and Symposium on Synchrotron Radiation in Natural Science - ISSRNS' 10 w Szklarskiej Porębie.
- Prezentacja posteru na temat projektu SPINLAB na konferencji 'Joint European Magnetic Symposia - JEMS 2010' w Krakowie.

Zadanie 13 jest w trakcie realizacji.



## 4. BIOTRANSFORMACJE użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym

PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE  
(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

### Zadanie 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych

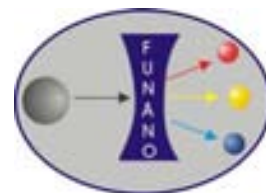
Prace badawcze prowadzone w ramach zadania 6 były podzielone na etapy kwartalne i dotyczyły dwóch układów enzymatycznych katalizujących syntezę alkoholi chiralnych: i) dehydrogenazy etylobenzenowej (EBDH) i ii) dehydrogenazy fenyloetanolowej (PEDH). Pierwszy kwartał roku 2010 poświęcono na sprowadzenie tematu badawczego dotyczącego PEDH do Polski. W tym celu mgr Agnieszka Dudzik przebywała na 2,5-miesięcznym wyjeździe studyjnym w grupie prof. Johana Heidera w Marburgu. Prace i szkolenie wykonane u niemieckiego partnera obejmowały techniki nadekspresji PEDH w szczepie *E.coli*, techniki preparatywnego oczyszczania enzymu oraz przeprowadzania testów aktywności. Przewieziony do Polski materiał biologiczny pozwolił prowadzić niezależne od partnera niemieckiego badania nad enzymem.

W drugim kwartale przeprowadzono optymalizację procedury hodowli *E.coli*, jak i procedury oczyszczania PEDH oraz EBDH (ze względu na zakup nowego chromatografu i nośników chromatograficznych). Przeprowadzono również liczne preparatywne oczyszczania obu enzymów w celu zapewnienia materiału do dalszych badań. Rozpoczęto również charakterystykę spektrum substratowego PEDH oraz kontynuowano dotychczasowe prace nad kinetyczną charakterystyką reaktywności EBDH. Badania kinetyczne mające za zadania możliwie szerokie scharakteryzowanie substratów obu enzymów były również kontynuowane w późniejszych etapach badań. W ich wyniku w trakcie roku 2010 przebadano 25 ketonów w reakcji stereo selektywnej redukcji z PEDH oraz 17 węglowodorów alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych w reakcji stereoselektywnego utleniania z EBDH. W przypadku PEDH przeprowadzono włącznie wstępną względną analizę kinetyczną, ze względu na skomplikowany mechanizm kinetyczny. Natomiast w przypadku EBDH uzyskano pełną charakterystykę kinetyczną dla większości substratów dopasowując model Michaelis-Menten z i bez inhibicji substratowej.

Kolejnym krokiem badań realizowanym w 3 i 4 kwartale 2010 było opracowanie metod chiralnej analizy mieszanin reakcyjnych dla obu enzymów, synteza standardów chiralnych, umożliwiających identyfikację produktów reakcji oraz optymalizację jonizacji LC-MS dla danej klasy związków. W ramach optymalizacji metod LC-MS opracowano na podstawie doniesień literaturowych podkolumnową mieszaninę umożliwiającą bezpieczną jonizację APCI w układzie normalnych faz (wysoka zawartość n-heksanu). W badaniach posłużono się cieczową chromatografią w układzie normalnych faz na chiralnej fazie stacjonarnej Chiracel OB oraz gazową chromatografią na kolumnie cyklodekstrynowej. Badania te pozwoliły scharakteryzować stereoselektywność substratową dla PEDH (14 związków) oraz EBDH (7 związków). Ponadto w 4 kwartale rozpoczęto ilościową kalibrację metod chromatograficznej analizy (w układzie RP-amideC18/DAD i GC/FID) w celu wyznaczenia konwersji badanych reakcji. Do końca grudnia uzyskano 14 metod z ilościową wielopunktową kalibracją na substratu i produkty (jeżeli były dostępne). Korzystając z tak opracowanych metod dokonano optymalizacji warunków reakcji PEDH w układzie z regeneracją kofaktora NADH za pomocą ko-substratu (izopropanolu). Wykazano wysoką odporność PEDH na organiczne środowisko reakcji.

## 5. FUNANO: Funkcjonalne nano i mikrocząsteczki

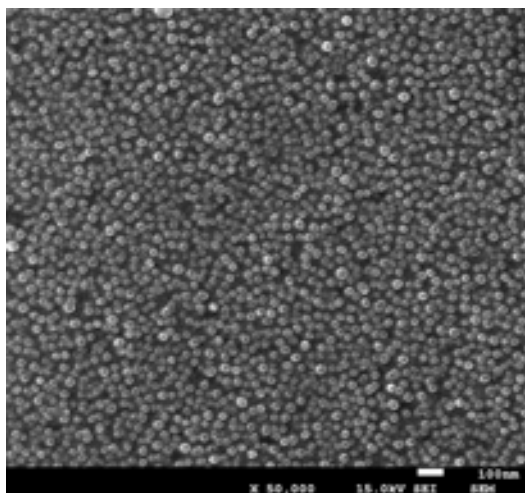
### - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach



POIG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Dokonano obszernej charakterystyki fizykochemicznej stabilizatorów polimerycznych i jonowych używanych w procesach syntezy suspensji nanocząstek metali szlachetnych, o kontrolowanej topologii, rozmiarach i właściwościach powierzchniowych. Przeprowadzono syntezy monodispersyjnych nanocząstek srebra oparte na redukcji roztworów wodnych  $\text{AgNO}_3$  przy pomocy  $\text{NaBH}_4$  w obecności alkoholu poliwinylowego (PVA) oraz cytrynianów używanych jako czynniki stabilizujące. Przeprowadzono obszerną charakterystykę fizykochemiczną suspensji nanocząstek srebra, wyznaczając ich widmo absorpcyjne, widmo fluorescencyjne, współczynnik dyfuzji (przy pomocy metody DLS), a także ruchliwość elektroforetyczną. Opracowano metodykę powtarzalnej syntezy cząstek srebra o rozmiarach kontrolowanych w przedziale 12-70 nm. Wykazano też, że suspensje te są stabilne w okresie czasu sięgającego roku. Przeprowadzono pomiary kinetyki osadzania otrzymanych zoli srebra w warunkach transportu dyfuzyjnego na warstewkach polimerów kationowych naniesionych na powierzchnie miki. Stężenie powierzchniowe cząstek (ilość cząstek na jednostkę powierzchni) oraz stopień pokrycia wyznaczano w sposób bezpośredni przez zliczanie ilości cząstek na określonych obszarach przy użyciu mikroskopii AFM oraz mikroskopii scanningowej (SEM). Na Rysunku 1 przedstawiona jest monowarstwa nanocząstek srebra o rozmiarach 16 nm osadzona na modyfikowanej PAH powierzchni miki. Uzyskano w tych pomiarach stopień pokrycia cząstkami ponad 30 %, co przekracza w znaczący sposób wartości uzyskane dotychczasowe w literaturze przedmiotu. Warto też wspomnieć, że zarówno kinetyka, jak również pokrycie maksymalne nanocząstek srebra zgadzały się dobrze z przewidywaniami teoretycznymi wynikającymi z modelu randomalnej, sekwencyjnej adsorpcji (RSA).



Rys. 1. Monowarstwa nanocząstek srebra (średni rozmiar cząstek 16 nm) osadzona na modyfikowanej PAH powierzchni miki. Warunki osadzania nanocząstek srebra  $c_b=35$  ppm,  $t=11$  h,  $\text{pH}=5,5$ ,  $I=10^{-4}$  M NaCl. Stężenie powierzchniowe cząstek  $615 \mu\text{m}^{-2}$ .

Przeprowadzone badania wykazały, że możliwe jest wytwarzanie na powierzchniach międzyfazowych filmów nanocząstek srebra, charakteryzujących się równomierną gęstością i kontrolowanym stopniem pokrycia.



## 6. VOX Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych

PO IG 2.1.1. [2009-2013] VOX

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska,

główny wykonawca: dr Tadeusz Machej)

Celem projektu jest opracowanie technologii otrzymywania skutecznych i niedrogich katalizatorów tlenkowych do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych z toksycznych gazów i par organicznych. Podstawą projektowania katalizatorów o innowacyjnej formule są syntetyczne minerały warstwowe, izomorficzne z hydrotalkitem, o ogólnym wzorze  $[(M^{2+})_{1-x}(M^{3+})_x(OH)_2](A^{n-})_{x/n} \cdot m H_2O$ , których specyficzna struktura pozwala na wymieszanie aktywnych katalitycznie pierwiastków na poziomie atomowym. Mieszaniny tlenków powstałe w wyniku rozkładu termicznego hydrotalkitów charakteryzują się topotaktycznymi zależnościami nanostruktur tlenkowych wchodzących w ich skład, co generuje unikatowe właściwości, nieosiągalne przy zastosowaniu innych metod syntezy. W szczególności, nasze badania układów katalitycznych otrzymanych na bazie hydrotalkitów miedziowo-chromowych wykazały, że otrzymane materiały przewyższają oparty na związkach miedzi i chromu katalizator komercyjny, a ich właściwości można łatwo dostosowywać do potrzeb danej reakcji chemicznej przez wprowadzenie kolejnych składników w strukturę prekursora. Na podstawie wyników uzyskanych w ramach dotychczas oprowadzonych badań można przewidywać, że otrzymane katalizatory będą swoimi parametrami dorównywać lub przewyższać kosztowne katalizatory na bazie metali szlachetnych. W roku 2010 przeprowadzono syntezę serii katalizatorów w oparciu o metodykę stanowiącą know-how autorów projektu. Obejmowała ona m.in. otrzymywanie prekursorów hydrotalkitowych zawierających jony metali przejściowych z roztworów wodnych i wodno-organicznych, w warunkach stałego lub zmiennego pH, temperatury w zakresie 0-90°C, a także z zastosowaniem warunków hydrotermalnych i kontrolowanego stopnia przesylenia mieszaniny reakcyjnej. Otrzymane hydrotalkity i tlenkowe produkty ich rozkładu termicznego zostały scharakteryzowane fizykochemicznie przy pomocy ICP OES, XRD, XPS, TPR, TG/DTG/DTA, BET, SEM, TEM. Przeprowadzono testy katalityczne otrzymanych materiałów w reakcji całkowitego spalania stosując jako związek modelowy toluen.

## 8. ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny

PO KL 4.1.1. [2010-2015] ISD MOLMED

(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)



Projekt Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie „Nauki molekularne dla medycyny” jest realizowany w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki. Projekt jest koordynowany przez prof. dr hab. Małgorzatę Witko z Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN. W projekcie uczestniczą następujące jednostki partnerskie: Wydział Chemii UJ, Wydział Lekarski UJ CM, Instytut Farmakologii PAN.

Pięcioletni projekt jest realizowany od 1 października 2011, a jego celem jest podniesienie jakości interdyscyplinarnego kształcenia na poziomie studiów doktoranckich w zakresie dziedzin: chemia, zaawansowane materiały, nanotechnologia, (bio)kataliza, chemia leków, farmakologia i medycyna przez otwarcie i realizację interdyscyplinarnych studiów doktoranckich. Jednocześnie równoległym celem jest zwiększenie potencjału dydaktycznego uczelni poprzez rozszerzenie i wzbogacenie oferty edukacyjnej na poziomie studiów III stopnia oraz podniesienie kompetencji dydaktycznych kadry akademickiej.

W I kwartale trwania projektu przeprowadzono konkurs na tematy prac doktorskich. Do realizacji wyłoniono 17 tematów. Docelowo projekt przewiduje 40 tematów, w ramach których zrealizowanych zostanie 40 prac doktorskich.



## **INNE ZADANIA**





# **1. Opracowanie nowego wydania (VI) podręcznika uniwersyteckiego "Podstawy Chemii Nieorganicznej"**

*(prof. Adam Bielański)*

Opracowanie nowego wydania (1045 stron) objęło sprawdzenie aktualności podawanych informacji oraz uzupełnienie tekstu nowymi wiadomościami: o rozpowszechnieniu pierwiastków w skorupie ziemskiej oraz we Wszechświecie, o wodzie i wiązaniach wodorowych w chemii nieorganicznej, a także o zastosowaniu spektrometrii w podczerwieni w chemii nieorganicznej.

Nowością jest także szerokie omówienie kondensacji akwajonów w roztworach wodnych, jako podstawy dla metody zol-żel.



## Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska Cezaś

(mgr Janusz Janas, dr Joanna Kryściak-Czerwenka,  
mgr Joanna Opalińska-Piskorz)

W 2010 roku w laboratorium Cezaś zostały przeprowadzone końcowe prace przygotowujące laboratorium do otrzymania akredytacji na zgłoszone metody badawcze. W marcu 2010 laboratorium zostało poddane "ocenie na miejscu" (audit akredytacyjny). W trakcie oceny stwierdzono 6 niezgodności z wymaganiami w obszarze technicznym. Ustalono przyczyny niezgodności oraz zaplanowano i wdrożono odpowiednie działania korygujące, które zostały pozytywnie ocenione przez Polskie Centrum Akredytacji (PCA). We wrześniu 2010, po podpisaniu kontraktu, laboratorium otrzymało Certyfikat Akredytacji Laboratorium Badawczego Nr AB 1221 wraz z Zakresem Akredytacji Nr AB 1221.

W 2010 roku laboratorium Cezaś zrealizowało:

1. 5 zleceń zewnętrznych na łączną kwotę 5 490,- zł (4 500,- zł + VAT). Zlecenia obejmowały pomiary:
  - konwersji lotnych zanieczyszczeń organicznych w zakładach przemysłowych,
  - skuteczności oczyszczania gazów odlotowych,
  - stężenia i składu chemicznego zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych,
  - charakterystyki procesu adsorpcji-desorpcji,
  - emisji gazowych zanieczyszczeń organicznych oraz sprawności rewersyjnych reaktorów katalitycznych,
2. 13 zleceń wewnętrznych z IKiFP PAN, obejmujących 14 różnych serii pomiarowych metodami:
  - chromatografii gazowej z detekcją masową,
  - spektroskopii w podczerwieni z wykorzystaniem przystawek DRIFT i ATR oraz metodą transmisyjną,
  - EDXRF – fluorescencji rentgenowskiej z dyspersją energii.
3. 2 porównania międzylaboratoryjne:
  - "Silesialab-2010, Porównanie międzylaboratoryjne BT0110" obejmujące pomiary własności fizykochemicznych oraz składu nieenergetycznych gazów odlotowych za pomocą urządzenia TESTO 350M/XL (wg PB-01 wydanie 2 z 6.08.2009), pomiar stężenia LZO (całkowitego węgla organicznego – wg normy PN-EN 13526:2005) oraz dodatkowo pomiary stężenia i emisji dwutlenku siarki SO<sub>2</sub> i CO<sub>2</sub> za pomocą analizatora spalin Testo 350 M/XL (metoda nie zgłoszona do akredytacji). Wyniki laboratorium uzyskane wg PB-01 oraz pomiary LZO w gazowym materiale odniesienia oceniono jako zadawalające,
  - "Badanie benzenu w gazach odlotowych" we współpracy z laboratorium LabAnalityka Sp z o.o., Brzeg Dolny obejmujące pomiary oznaczanie zawartości par benzenu w mieszaninie metodą chromatografii gazowej z detekcją fotojonizacyjną w warunkach *in-situ* za pomocą chromatografu gazowego Voyager (wg PB-03, wydanie 2 z 6.08.2010). Wyniki oceniono jako zadawalające.
4. 2 badania biegłości obejmujące procedury badawcze:
  - PB-04 "Oznaczanie epichlorohydryny metodą FT-IR na aparacie Gasmeter DX-4000", wydanie 2 z 6.08.2010,
  - PB-06 "Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą FT-IR w warunkach *in-situ* za pomocą analizatora Gasmeter DX-4000", wydanie 2 z 6.08.2010.

Otrzymane wyniki potwierdziły biegłość laboratorium dotyczącą PB-04 i PB-06.

## **WSPÓLPRACA Z INNYMI INSTYTUCJAMI I PRZEMYSŁEM W ROKU 2010**

Prace o charakterze aplikacyjnym stanowią bardzo ważny aspekt działalności Instytutu. Grupy badawcze Instytutu wykonują szereg ekspertyz naukowych, nadzorują zastosowanie wyników swoich prac badawczych w praktyce, proponują nowe rozwiązania technologiczne.

W szczególności wyróżnić należy dwa kierunki prac aplikacyjnych Instytutu:

- zastosowania metody katalitycznego oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych
- zapobieganie niszczącemu działaniu zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe

### **1. Katalityczne oczyszczanie przemysłowych gazów odlotowych**

Opracowana w Instytucie unikatowa metoda "Swingtherm" wykorzystująca rewersyjne reaktory katalityczne do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych wymaga stałych prac nad rozwojem poziomu technicznego oraz rozszerzeniem gamy jego zastosowań.

Prace te ukierunkowane są na:

- rozwój zastosowań, dobór katalizatorów i warunków reakcji dla konkretnych instalacji przemysłowych (rodzaj zanieczyszczeń, skład ilościowy, wielkość emisji), z których usuwane mają być zanieczyszczenia gazowe. Prace te wykonywane są m.in. w ramach działalności statutowej Instytutu i grantów krajowych i międzynarodowych.
- projektowanie i rozwój instalacji rewersyjnych reaktorów katalitycznych dla różnych wielkości instalacji przemysłowych i zastosowań.

Prowadzona jest ścisła współpraca z przedsiębiorstwami, którym udzielono licencji na produkcję i stosowanie instalacji opartych o metodę "Swingtherm". Współpraca ukierunkowana jest na prace rozwojowe nad wdrożeniami nowych instalacji i nadzór autorski nad eksploatowanymi urządzeniami (badania sprawności reaktorów rewersyjnych i aktywności katalizatorów stosowanych w pracujących instalacjach katalitycznych). W szczególności współpraca ta dotyczy firmy-córki IKIFP PAN "Katalizator" sp. z o.o.

Utworzone w 2006 roku, dzięki finansowaniu z funduszy Sektorowych Programów Operacyjnych, laboratorium "Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CEZaŚ", którego zadaniem jest prowadzenie pomiarów i badań z zakresu ochrony środowiska na rzecz podmiotów gospodarczych i instytucji w roku 2010 wykonało:

- pomiary sprawności rewersyjnego dopalacza katalitycznego KATERM 6.0 w PPUH BISS w Kolbuszowej
- pomiary w trakcie rozruchu technologicznego instalacji oczyszczania gazów odlotowych z linii lakierniczej zakładów Lachman – Interior Design, Prostějov, Republika Czeska
- pomiary stężenia tlenu oraz CO, NO, NO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, CO<sub>2</sub> i węglowodorów od C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> oraz lotnych zanieczyszczeń organicznych w atmosferze nad materiałem stałym pochodzącym ze zgazowania węgla dla Katedry Ekologii Terenów Przemysłowych Wydziału Górnictwa i Geoinżynierii AGH
- oznaczenia gazów emitowanych z suszarki przy produkcji uszczelek dla Katalizator Sp z o.o.
- pomiary składu atmosfery nad zabezpieczonymi 4 próbkami gleby dla Biegłego Sądowego z listy Sądu Okręgowego w Krakowie Mariusza Kolbera we współpracy z ekspertyza dla Prokuraturą Okręgową w Krakowie
- porównanie międzylaboratoryjne "Silesialab-2010, Porównanie międzylaboratoryjne BT0110" obejmujące pomiary własności fizykochemicznych oraz składu nieenergetycznych gazów odlotowych we współpracy z Ośrodkiem Badań i Kształtowania Środowiska sp. z o.o. w Katowicach

- porównanie międzylaboratoryjnym "Badanie benzenu w gazach odlotowych" obejmujące pomiary oznaczanie zawartości par benzenu w mieszaninie we współpracy z laboratorium LabAnalytika sp z o.o., Brzeg Dolny

## 2. Zapobieganie niszczącemu działaniu zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe

Instytut zyskał wysoką renomę w środowiskach konserwatorskich w związku z pracami grupy doc. R. Kozłowskiego nad wyjaśnieniem fizykochemii mechanizmów zjawisk powodujących zniszczenia obiektów zabytkowych przez zanieczyszczenia środowiska naturalnego. Badania te prowadzone są w ramach prac statutowych Instytutu, kilku projektów Unii Europejskiej oraz na zlecenia instytucji ochrony zabytków.

W 2010 roku wykonano m.in.:

- analizę stanu zachowania polichromii i ocena skuteczności zastosowanych działań konserwatorskich", dla "Monument Service - Marcin Kosarzewski" w ramach projektu EEA "Ratunkowe prace konserwatorskie krużganków Zamku Lidzbarskiego"

## 3. Inne opracowania i badania

- badania właściwości fizykochemicznych próbek przemysłowych tlenków molibdenu dla ChemieMetall GmbH w Bitterfeld
- synteza próbek lateksów polistyrenowych o ściśle zdefiniowanych właściwościach powierzchniowych dla Instytutu Biotechnologii Surowic i Szczepionek Biomed S.A. w Krakowie
- synteza próbek lateksów polistyrenowych o ściśle zdefiniowanych właściwościach powierzchniowych dla Biomex sp. z o. w Krakowie
- Hydrogenation of Amylanthraquinone in the Presence of Palladium Catalysts dla Solvay Research & Technology w Brukseli
- badania próbek desilikonowanych zeolitów z zastosowanie elektronowego mikroskopu skaningowego dla Uniwersytetu Jagiellońskiego
- pomiary XRD materiałów mezotorowatych dla Politechniki Krakowskiej
- analiza stanu zachowania polichromii i ocena skuteczności zastosowanych działań konserwatorskich dla Monument Service - Marcin Kosarzewski
- badania wielofunkcyjnych katalizatorów na osnowie minerałów warstwowych do jednoetapowego procesu: gaz syntezowy > metanol > eter dimetylowy dla Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN w Zabrze
- pomiary grubości warstwy polimerowej techniką spektroskopowej elipsometrii obrazującej oraz badanie oddziaływań między powierzchnią polimeru i środowiskiem hodowli komórek dla Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN w Zabrze
- wykonanie analiz fizykochemicznych materiałów stopowych Z.-Co-Mo, Zn-Ni-Mo, Zn-Mn-W dla Instytutu Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN w Krakowie
- badania próbek krzemionki przy użyciu elektronowego mikroskopu skaningowego dla Varian R&D Consumable Products w Middleburg
- wykonanie badań morfologicznych i dyspersji z użyciem SEM dla Synthos S.A. w Oświęcimiu
- analizy XDR preparatów proszkowych z analizą fazową metodą Rietvelde dla NV w Gent
- badania morfologii nanokompozytów na bazie biopolimerów przy użyciu SEM dla Uniwersytetu Rolniczego w Krakowie
- badania morfologii metodą SEM i analizy składu chemicznego metodą EDS zabytkowych tkanin na Zamku Królewskim na Wawelu
- badania morfologii metodą SEM i BSE (COMPO) oraz analizy składu chemicznego metodą EDS próbek Au-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/CuO dla Akademii Górniczo-Hutniczej
- pomiary i analiza widm fotoelektronowych dla ABB sp. z o.o. w Warszawie

- werifikacyjne badania elektrochemiczne i elipsometryczne wybranych próbek po procesach polerowania, obróbki anodowej, pasywacji i anodowej modyfikacji warstw wierzchnich stopów lekkich i stopów tytanu oraz powłok kadmowych i stopowych dla Politechniki Śląskiej



# DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2010

## PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

### KSIĄŻKI

1. A. Bielański, "Podstawy Chemii Nieorganicznej" (M. Galus, ed.), Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2010, wydanie szóste zaktualizowane i uzupełnione, [ISBN: 978-83-01-16281-8 tom 1, 978-83-01-16282-5 tom 2]

### PRACE PRZEGLĄDOWE I ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. Z. Adamczyk, M. Nattich, A. Bratek, "Adsorption and Deposition of Particles, Polyelectrolytes and Biopolymers", in: "Nanoscience: Colloidal and Interfacial Aspects" (V. Starov, ed.), Taylor & Francis, Oxford-New York 2010, Chapter 21 [ISBN 978-1-4200-6500-8]
2. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Zaucha, "Electrokinetics of Particle Covered Surfaces", *Current Opinion in Colloid and Interface Sci.*, 15 (2010) 175-183
3. Z. Adamczyk, K. Sadlej, E. Wajnryb, M. Nattich, M.L. Ekiel-Jeżewska, J. Bławdziewicz, "Streaming Potential Studies of Colloid, Polyelectrolytes and Protein Deposition", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 153 (2010) 1-29
4. Ł. Bratasz, "Acceptable and Non-acceptable Microclimate Variability: The Case of Wood", in: "Basic Environmental Mechanisms Affecting Cultural Heritage. Understanding Deterioration Mechanisms for Conservation Purposes. COST Action D42." (D. Camuffo, V. Fassina, J. Havermans, eds.), Nardini Editore, Firenze 2010, pp.49-58
5. E. Broclawik, M. Mitoraj, P. Rejmak, A. Michalak, "From Electron Density Flow Towards Activation: Metal Sites in Zeolites from the Combined Extended Transition State (ETS) Method and the Natural Orbitals for Chemical Valence (NOCV) Perspective", in: "Handbook of Inorganic Chemistry Research" (D.A. Morissn, ed.), Nova Science Publishers, Inc, New York 2010, Chapter 11 [ISBN 978-1-61668-010-7]
6. E. Broclawik, L. Uvarova, "Particles of Biomedical Relevance and Their Interactions: A Classical and Quantum Mechanistic Approach to a Theoretical Description", in: "Nanoparticles in Medicine and Environment" (J.C.M.Marijnissen, L.Gradon, eds), Springer Verlag, Berlin 2010, pp.173-186 [ISBN 978-90-48-263-6]
7. J. Plona, M. Śliwa, A. Pacuła, D. Mucha, D. Napruszewska, R. Dula, R. Grabowski, E.M. Serwicka, "Wielofunkcyjne katalizatory na osnowie minerałów warstwowych do jednoetapowego procesu: gaz syntezowy → metanol → eter dimetylowy", in: "Studium koncepcyjne wybranych technologii, perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla – osiągnięcia i kierunki badawcze. Tom 2. Synteza produktów chemicznych" (J. Kijeński, J. Machnikowski, M. Ścieżko, eds.), Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla, Zabrze 2010, pp.62-83 [ISBN 978-83-930194-0-3, 978-83-930194-1-0]



8. B. Jachimska, "Physicochemical Characterization of Anisotropic Molecules (Polyelectrolytes and Proteins) in Bulk Solutions", in: "Colloids in Biotechnology, Series: Surfactant Sciences, Vol.152" (M. Fanun, ed.), CRC Press, Boca Raton 2010, Chapter 4
9. R. Kozłowski, D.C. Hughes, J. Weber, "Roman Cements - Key Materials of the Built Heritage of the Nineteenth Century", in: "Materials, Technologies and Practice in Historic Heritage Structures" (M. Bostenaru-Dan, R. Přikryl, A. Török, eds), Springer Verlag, Berlin 2010, pp.259-278 [ISBN 978-90-481-2683-5]
10. P. Nowak, "Influence of Surfactant Adsorption on the Leaching of Copper Sulfides", in: "Electrochemistry in Mineral and Metal Processing VIII, ECS Transactions 28(6)" (F.M. Doyle, R. Woods, G.H. Kelsall, eds), The Electrochemical Society, Pennington 2010, pp.143-153 [ISBN 978-1-56677-796-4]
11. P. Ozga, Z. Świątek, A. Dębski, J. Bonarski, L. Tarkowski, E. Bielańska, P. Handzlik, B. Onderka, M. Michalec, "Warstwy i powłoki ochronne zastępujące kadm na bazie stopów cynku z żelazowcami oraz manganem otrzymywane elektrolitycznie z kąpieli kompleksowych", in: "Nowoczesne technologie oraz zaawansowane materiały i wyroby w zrównoważonym rozwoju przemysłu metali nieżelaznych", IM Gliwice 2010, pp.295-306 [ISBN 978-83-925546-6-0]

#### **ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O CYRKULACJI MIĘDZYNARODOWEJ**

1. Z. Adamczyk, J. Barbasz, M. Cieśla, "Kinetics of Fibrinogen Adsorption on Hydrophilic Substrates", *Langmuir*, 26 (2010) 11934-11945
2. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, "Irreversible Adsorption of Latex Particles on Fibrinogen Covered Mica", *Adsorption*, 16 (2010) 259-269
3. Z. Adamczyk, K. Sadlej, E. Wajnryb, M.L. Ekiel-Jezewska, P. Warszyński, "Hydrodynamic Radii and Diffusion Coefficients of Particle Aggregates Derived from the Bead Model", *J. Colloid Interface Sci.*, 347 (2010) 192-201
4. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Zeta Potential of Mica Covered by Colloid Particles: A Streaming Potential Study", *Langmuir*, 26 (2010) 9368-9377
5. J. Adamski, P. Nowak, J. Kochana, "Simple Sensor for the Determination of Phenol and Its Derivatives in Water based on Enzyme Tyrosinase", *Electrochimica Acta*, 55 (2010) 2363-2367
6. K. Alexopoulos, P. Hejduk, M. Witko, M.-F. Reyniers, G.B. Marin, "Theoretical Study of the Effect of (001) TiO<sub>2</sub> Anatase Support on V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>", *J. Phys. Chem., C*, 114 (2010) 3115-3130
7. J. Baran, M. Baj-Krzyworzeka, K. Węglarczyk, R. Szatanek, M. Zembala, J. Barbasz, A. Czupryna, A. Szczepanik, "Circulating Tumour-derived Microvesicles in Plasma of Gastric Cancer Patients", *Cancer Immunology Immunotherapy*, 59 (2010) 841-850

8. C.J. Bergsten, M. Odlyha, S. Jakiela, J. Slater, A. Cavicchioli, D.L.A. de Faria, A. Niklasson, J.-E. Svensson, L. Bratasz, D. Camuffo, A. della Valle, F. Baldini, R. Falciai, A. Mencaglia, F. Senesi, C. Theodorakopoulos, "Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organs (SENSORGAN)", *e-Preservation*, 7 (2010) 116-125
9. A. Bielański, A. Micek-Ilnicka, "Kinetics and Mechanism of Gas Phase MTBE and ETBE Formation on Keggin and Wells-Dawson Heteropolyacids as Catalysts", *Inorg. Chimica Acta*, 363 (2010) 4158-4162
10. T. Borowski, V. Georgiev, P.E.M. Siegbahn, "On the Observation of a Gem Diol Intermediate after O-O Bond Cleavage by Extradiol Dioxygenases. A Hybrid DFT Study", *J. Mol. Model.*, 16 (2010) 1673-1677
11. T. Borowski, H. Noack, M. Radoń, K. Zych, P.E.M. Siegbahn, "Mechanism of Selective Halogenation by SyrB2 - A Computational Study", *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (2010) 12887-12898
12. A. Bressel, J. Frey, U. Filek, B. Sulikowski, D. Freude, M. Hunger, "Oxygen Coordination of Aluminum Cations in Dehydrated  $AlPW_{12}O_{40}$  Investigated by Solid-state NMR Spectroscopy", *Chem. Phys. Lett.*, 487 (2010) 285-290
13. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka, "New Insights into Charge Flow Processes and their Impact on the Activation of Ethene and Ethyne by Cu(I) and Ag(I) Sites in MFI", *J. Phys. Chem. C*, 114 (2010) 9808-9816
14. D. Camuffo, E. Pagan, S. Rissanen, Ł. Bratasz, R. Kozłowski, M. Camuffo, A. della Valle, "An Advanced Church Heating System Favourable to Artworks: A Contribution to European Standardisation", *J. Cultural Heritage*, 11 (2010) 205-219
15. N. Carmona, A. Kowal, J.-M. Rincon, M.-A. Villegas, "AFM Assesment of the Surface Nano/microstructure on Chemically Damaged Historical and Model Glasses", *Mater. Chem. Phys.*, 119 (2010) 254-260
16. A. Dobija, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, "Powder Diffraction Data of Novel Complexes  $CdX_2 \cdot 2(NH_2-PhY)$ , Part I", *Powder Diffr.*, 25 (2010) 359-367
17. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, M. Mroczkowska, M. Mosiałek, G. Mordarski, "Co-Doped Ceria-based Solid Solution in the  $CeO_2-M_2O_3-CaO$ ,  $M=Sm, Gd$  System", *Electrochimica Acta*, 55 (2010) 4387-4394
18. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E.M. Serwicka, D. Rutkowska-Żbik, E. Bielańska, R. Socha, A. Bukowska, W. Bukowski, "Preparation and Characterization of  $RuCl_3$ -Diamine Group Functionalized Polymer", *React. Funct. Polymers*, 70 (2010) 382-391
19. J. Dziejczak, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, C. Simon, I. Kumakiri, "Photocatalytic Degradation of the Humic Species as a Method of their Removal from Water - cComparison of UV and Artificial Sunlight (ASL) Irradiation Efficiency", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 45 (2010) 15-28

20. M. Elżbieciak, D. Wodka, S. Zapotoczny, P. Nowak, P. Warszyński, "Characteristics of Model Polyelectrolyte Multilayer Films Containing Laponite Clay Nanoparticles", *Langmuir*, 26 (2010) 277-283
21. M. Filek, B. Gzyl-Malcher, M. Zembala, E. Bednarska, P. Laggner, M. Kriechbaum, "Effect of Selenium on Characteristics of Rape Chloroplasts Modified by Cadmium", *J. Plant Physiology*, 167 (2010) 28-33
22. V. Georgiev, H. Noack, T. Borowski, M.R.A. Blomberg, P.E.M. Siegbahn, "DFT Study on the Catalytic Reactivity of a Functional Model Complex for Intradiol-Cleaving Dioxygenases", *J. Phys. Chem. B*, 114 (2010) 5878-5885
23. B. Gil, B. Marszałek, A. Micek-Ilnicka, Z. Olejniczak, "The Influence of Si/Al Ratio on the Distribution of OH Groups in Zeolites with MWW Topology", *Topics Catal.*, 53 (2010) 1340-1348
24. B. Gil, L. Mokrzycki, B. Sulikowski, Z. Olejniczak, S. Walas, "Desilication of ZSM-5 and ZSM-12 Zeolites: Impact on Textural, Acidic and Catalytic Properties", *Catal. Today*, 152 (2010) 24-32
25. A.J. Groszek, E. Lalik, J. Haber, "Heats of Interaction of Hydrogen with Gold and Platinum Powders and its Effect on the Subsequent Adsorptions of Oxygen and Noble Gases", *Appl. Surf. Sci.*, 256 (2010) 5498-5502
26. J. Gurgul, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, N. Spiridis, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, "Exchange-bias in Epitaxial CoO/Fe Bilayer Grown on MgO(001)", *Surf. Interface Anal.*, 42 (2010) 696-698
27. J. Gurgul, K. Łątka, A.W. Pacyna, C.P. Sebastian, R. Pöttgen, "<sup>119</sup>Sn Mössbauer Spectroscopy of the Intermetallic Compound HoRhSn", *Intermetallics*, 18 (2010) 129-133
28. P. Hejduk, M. Szaleniec, M. Witko, "Molecular and Dissociative Adsorption of Water at Low-index V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces: DFT Studies Using Cluster Surface Models", *J. Mol. Catal. A*, 325 (2010) 98-104
29. B. Jachimska, T. Jasiński, P. Warszyński, Z. Adamczyk, "Conformations of Poly(allylamine hydrochloride) in Electrolyte Solutions: Experimental Measurements and Theoretical Modeling", *Colloids Surf. A*, 355 (2010) 7-15
30. E. Jarek, T. Jasiński, W. Barzyk, P. Warszyński, "The pH Regulated Surface Activity of Alkanoic Acids", *Colloids Surf. A*, 354 (2010) 188-196
31. P. Jóźwik, R. Grabowski, Z. Bojar, "Catalytic Activity of Ni<sub>3</sub>Al Foils in Methanol Reforming", *Mater. Sci. Forum*, 636-637 (2010) 895-900
32. N.-T.H. Kim-Ngan, A.G. Balogh, J. Brötz, M. Zajac, J. Korecki, "Interface Properties of Single and Bi-Layer Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Films Grown on MgO(001) Studied by RBS and Channeling Experiments", *Acta Physica Polon. A*, 118 (2010) 570

33. A. Klisińska-Kopacz, R. Tislova, G. Adamski, R. Kozłowski, "Pore Structure of Historic and Repair Roman Cement Mortars to Establish their Compatibility", *J. Cultural Heritage*, 11 (2010) 404-410
34. R. Kosydar, A. Drelinkiewicz, J.P. Ganhy, "Degradation Reactions in Anthraquinone Process of Hydrogen Peroxide Synthesis", *Catal. Lett.*, 139 (2010) 105-113
35. I. Kumakiri, C. Simon, K. Szczepanowicz, D. Wodka, P. Nowak, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, "Removal of Natural Organic Matter from Potable Water using Photocatalytic Membrane Reactor", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 45 (2010) 73-84
36. A. Lewandowska, M. Kępczyński, J. Bednar, E. Rząd, V. Moravcikova, B. Jachimiska, M. Nowakowska, "Silicone-stabilized Liposomes", *Colloid Polymer Sci.*, 288 (2010) 37-45
37. M. Li, A. Kowal, K. Sasaki, N. Marinkovic, D. Su, E. Korach, P. Liu, R/R. Adzic, "Ethanol Oxidation on the Ternary Pt-Rh-SnO<sub>2</sub>/C Electrocatalysts with Varied Pt:Rh:Sn Ratio", *Electrochimica Acta*, 55 (2010) 4331-4338
38. M. Lipińska, A. Orzechowska, J. Fiedor, A.I. Chumakov, T. Ślęzak, M. Zając, K. Matlak, J. Korecki, A. Hałas, K. Strzałka, L. Fiedor, K. Burda, "Influence of Cd<sub>2</sub><sup>+</sup> on the Spin State of Non-heme Iron and on Protein Local Motions in Reactions Centers from Purple Photosynthetic Bacterium *Rhodospirillum rubrum*", *J. Phys. Conf. Ser.*, 217 (2010) 012021
39. P. Luches, S. Benedetti, L. Pasquini, F. Boscherini, M. Zając, J. Korecki, R. Rüffer, S. Valeri, "Depth-dependent Magnetic Characterization of Fe Films on NiO(001)", *Nucl. Instr. Methods Physics Res. B*, 268 (2010) 361
40. K. Lunkenheimer, K. Małysa, K. Winsel, K. Geggel, S. Siegel, "Novel Method and Parameters for Testing and Characterization of Foam Stability", *Langmuir*, 26 (2010) 3883-3888
41. W. Łasocha, B. Gaweł, A. Rafalska-Łasocha, M. Pawłowski, P. Talik, W. Paszkowicz, "Crystal Structure Study of Selected Xanthine Derivatives", *J. Appl. Cryst.*, 43 (2010) 163-167
42. A. Martinez, M.A. Arribas, M. Derewiński, A. Burkat-Dulak, "Enhanced Sulfur Resistance of Bifunctional Pd/HZSM-5 Catalyst Comprising Hierarchical Carbon-templated Zeolite", *Appl. Catal. A*, 379 (2010) 188-197
43. L. Matachowski, R.P. Socha, D. Mucha, M. Zimowska, J. Gurgul, "Silver Nanowires as a Result of Irradiation or Hydrogen Reduction of Ag<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> Salt", *Surf. Interface Anal.*, 42 (2010) 757-761
44. A. Michna, Z. Adamczyk, B Siwek, M. Oćwieja, "Silver Nanoparticle Monolayers on Poly(ethylene imine) Covered Mica Produced by Colloidal Self-assembly", *J. Colloid Interface Sci.*, 345 (2010) 187-193
45. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński, "Improvement of Wetting Properties of Colloid Silica Binders", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 49 (2010) 8532-8537

46. A. Niecikowska, J. Zawała, R. Miller, K. Małyśa, "Dynamic Adsorption Layer Formation and Time of Bubble Attachment to a Mica Surface in Solutions of Cationic Surfactants (CnTABr)", *Colloids Surf. A*, 365 (2010) 14-20
47. N. Nosidlak, R.P. Socha, D. Wodka, J. Sanetra, E. Kulig, "The Influence of Dispersed Nano-sized Particles on P3OT-Based Photovoltaic Device", *Modern Polymeric Materials for Environmental Applications*, 4 (2010) 255-262
48. P. Nowak, M. Skompska, A. Więckowski, "2<sup>nd</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/ Liquid Interface (ISSIS) - Foreword", *Electrochimica Acta*, 55 (2010) 4329-4330
49. A. Orzechowska, M. Lipińska, J. Fiedor, A. Chumakov, M. Zając, T. Ślęzak, K. Matlak, K. Strzałka, J. Korecki, L. Fiedor, K. Burda, "Coupling of Collective Motions of the Protein Matrix to Vibrations of the Non-heme Iron", *Biochim. Biophys. Acta, Bioenergetics*, 1797 (2010) 1696
50. Ł. Orzeł, A. Kania, D. Rutkowska-Żbik, A. Susz, G. Stochel, L. Fiedor, "Structural and Electronic Effect in the Metalation of Porphyrinoids. Theory and Experiment", *Inorg. Chem.*, 49 (2010) 7362-7371
51. M. Oszejca, N. Juszczak, W. Łasocha, "Bis(4-chloroanilinum) trimolybdate - Synthesis and Structural Studies of a New Polymolybdate Material", *J. Mol. Struct.*, 965 (2010) 131-136
52. H. Pálková, J. Madejová, M. Zimowska, E.M. Serwicka, "Laponite-derived Porous Clay Heterostructures: II. FTIR Study of the Structure Evolution", *Microporous. Mesoporous Mater.*, 127 (2010) 237-244
53. H. Pálková, J. Madejová, M. Zimowska, E. Bielańska, Z. Olejniczak, L. Lityńska-Dobrzyńska, E.M. Serwicka, "Laponite-derived Porous Clay Heterostructures: I. Synthesis and Physicochemical Characterization", *Microporous Mesoporous Mater.*, 127 (2010) 228-236
54. T. Pańczyk, V. Fiorin, T.P. Warzocha, "Influence of the Rotational Degrees of Freedom on the Initial Sticking Probability of Water on Pt {110}-(1×2): A Molecular Dynamics Study", *J. Chem. Phys.*, 133 (2010) 034708
55. T. Pańczyk, T.P. Warzocha, P.J. Camp, "A Magnetically Controlled Molecular Nanocontainer as a Drug Delivery System: The Effects of Carbon Nanotube and Magnetic Nanoparticle Parameters from Monte Carlo Simulations", *J. Phys. Chem. C*, 114 (2010) 21299–21308
56. G. Para, A. Hamerska-Dudra, K.A. Wilk, P. Warszyński, "Surface Activity of Cationic Surfactants; Influence of Molecular Structure", *Colloids Surf. A*, 365 (2010) 215–221
57. W. Paszkowicz, P. Piszora, W. Łasocha, I. Margiolaki, M. Brunelli, A. Fitch, "Lattice Parameter of Polycrystalline Diamond in the Low-temperature Range", *Acta Phys. Polon. A*, 117 (2010) 323-327
58. W. Płaziński, "The Statistical Rate Theory Approach to Description of the pH-Dependent Kinetics of Metal ions Adsorption", *J. Phys. Chem. C*, 114 (2010) 9952-9954

59. W. Płaziński, "Applicability of the Film-diffusion Model for Description of the Adsorption Kinetics at the Solid/solution Interfaces", *Appl. Surf. Sci.*, 256 (2010) 5157-5163
60. W. Płaziński, W. Rudziński, "Heavy Metals Binding to Biosorbents. Insights into Non-competitive Models from a Simple pH-Dependent Model", *Colloids Surf. B*, 80 (2010) 133-137
61. W. Płaziński, W. Rudziński, "Binding Stoichiometry in Sorption of Divalent Metal Ions: A Theoretical Analysis Based on the Ion-exchange Model", *J. Colloid Interface Sci.*, 344 (2010) 165-170
62. W. Płaziński, W. Rudziński, "A Novel Two-Resistance Model for Description of the Adsorption Kinetics onto Porous Particles", *Langmuir*, 26 (2010) 802-808
63. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "Electronic Structure of Selected {FeNO}(7) Complexes in Heme and Non-Heme Architectures: A Density Functional and Multireference *ab Initio* Study", *J. Phys. Chem. B*, 114 (2010) 1518-1528
64. A. Rafalska-Łasocha, Z. Kaszowska, W. Łasocha, R. Dziembaj, "X-Ray Powder Diffraction Investigation of Green Earth Pigments", *Powder Diffr.*, 25 (2010) 38-45
65. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, M. Grzesiak, R. Dziembaj, "X-Ray Powder Diffraction Investigations of Ruthenian-byzantine Frescoes from the Royal Wawel Cathedral (Poland)", *Powder Diffr.*, 25 (2010) 258-263
66. P. Rejmak, M. Mitoraj, E. Broclawik, "Electronic View on Ethene Adsorption in Cu(I) Exchanged Zeolites", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 12 (2010) 2321-2330
67. P.P. Romańczyk, K. Noga, A.J. Włodarczyk, W. Nitek, E. Broclawik, "Torsionally Controlled Electronic Coupling in Mixed-Valence Oxodimolybdenum Nitrosyl Scorpionates - A DFT Study", *Inorg. Chem.*, 49 (2010) 7676-7684
68. O.J. Romieu, L. Zimányi, P. Warszyński, B. Levallois, F.J. Cuisinier, D. Deville de Périère, B. Jacquot, "Modeling Colorant Leakage Techniques: Application to Endodontics", *Dental Materials*, 26 (2010) 881-890
69. W. Rudziński, W. Płaziński, "How Does Mechanism of Biosorption Determine the Differences between the Initial and Equilibrium Adsorption States?", *Adsorption*, 16 (2010) 351-357
70. W. Rudziński, M. Witko, "Comments on the Seventh International Symposium 'Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids'", *Appl. Surf. Sci.*, 256 (2010) 5127-5130
71. M. Ruggiero-Mikołajczyk, L. Suski, G. Mordarski, J. Kołacz, R. Grabowski, "Dependencies of the Open-circuit Voltage of Au/YSZ/Pt Single-chamber Fuel on the Composition of the Uniform CH<sub>4</sub>+O<sub>2</sub> Gas Mixture with the Solid Carbon Deposition", *Electrochimica Acta*, 55 (2010) 8513-8516

72. R. Skrzela, G. Para, P. Warszyński, K.A. Wilk, "Experimental and Theoretical Approach to Nonequivalent Adsorption of Novel Dicephalic Ammonium Surfactants at the Air/Solution Interface", *J. Phys. Chem. B*, 114 (2010) 10471-10480
73. R.P. Socha, E. Zackiewicz, N. Spiridis, J. Korecki, "Au Adsorption on Defect-rich MgO(100) Surfaces", *Surf. Interface Anal.*, 42 (2010) 536-539
74. S. Stankov, M. Sladeczek, T. Ślęzak, J. Łażewski, R. Röhlsberger, B. Sepioł, G. Vogl, A.I. Chumakov, R. Ruffer, N. Spiridis, M. Zając, M. Ślęzak, K. Parliński, J. Korecki, "Phonons in Iron Monolayers", *J. Phys. Conf. Ser.*, 217 (2010) 012144
75. M. Strojcecki, M. Krośnicki, P. Zgoda, J. Koperski, "Characterization of Bound Parts of the  $b^3O_u^+$  ( $5^3P_1$ ),  $c^3I_u$  ( $5^3P_2$ ) and  $X^1O_g^+$  States of  $Cd_2$  Revisited: Bound-bound Excitation and Dispersed Emission Spectra", *Chem. Phys. Lett.*, 489 (2010) 20-24
76. P. Szabelski, T.P. Warzocha, T. Pańczyk, "Thermal Desorption of Chiral Molecules from a Nanostructured Chiral Surface: Insights from Computer Simulations", *Thermochimica Acta*, 497 (2010) 77-84
77. M. Szaleniec, T. Borowski, K. Schühle, M. Witko, J. Heider, "Ab initio Modeling of Ethylbenzene Dehydrogenase Reaction Mechanism", *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (2010) 6014-6024
78. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, P. Warszyński, "Encapsulation of Liquid Cores by Layer-by-layer Adsorption of Polyelectrolytes", *J. Microencapsulation*, 27 (2010) 198-204
79. K. Szczepanowicz, H.J. Hoel, L. Szyk-Warszyńska, E. Bielańska, A.M. Bouzga, G. Gaudernack, C. Simon, P. Warszyński, "Formation of Biocompatible Nanocapsules with Emulsion Core and Pegylated Shell by Polyelectrolyte Multilayer Adsorption", *Langmuir*, 26 (2010) 12592-12597
80. K. Szczepanowicz, J. Stefańska, R.P. Socha, P. Warszyński, "Preparation of Silver Nanoparticles via Chemical Reduction and their Antimicrobial Activity", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 45 (2010) 85-98
81. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, P. Warszyński, "Formation and Stability of Poly-L-lysine multilayers", *Adsorption*, 16 (2010), 241-248
82. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybala, P. Warszyński, "Deposition of Latex Particles Encapsulated in Polyelectrolyte Shells at Heterogeneous Metal Surfaces Modified by Multilayer Films", *Appl. Surf. Sci.*, 256 (2010) 5388-5394
83. T. Ślęzak, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, M. Rennhofer, R. Ruffer, B. Sepioł, N. Spiridis, S. Stankov, M. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, J. Korecki, "Magnetism of Ultra-thin Iron Films Seen by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", *J. Phys. Conf. Ser.*, 217 (2010) 012090

84. T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Zając, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Partyka-Jankowska, M. Rennhofer, A. I. Chumakov, S. Stankov, R. Ruffer, J. Korecki, "Non-collinear Magnetization Structure at the Thickness Driven Spin Reorientation Transition in Epitaxial Fe Films on W(110)", *Phys. Rev. Lett.*, 105 (2010) 027206
85. P. Tomczyk, S. Żurek, M. Mosiałek, "Effect of Time and Polarization on Kinetics of the Oxygen Electrode Reaction at an Au|YSZ Interface", *J. Electroceram.*, 23 (2009) 25-36 [printed 2010]
86. B. Trzewik, T. Seidler, E. Broclawik, K. Stadnicka, "Mechanisms of Reactions Conducted on  $\alpha$ -Amido- $\alpha$ -aminonitrones, Determined Based on the Structures of their Crystalline Products and DFT Calculations", *New J. Chem.*, 34 (2010) 2220-2228
87. P. Waligórski, M. Szaleniec, "Prediction of White Cabbage (*Brassica oleracea* var. *capitata*) Self-incompatibility Based on Neural Network and Discriminant Analysis of Complex Electrophoretic Patterns", *Comput. Biol. Chem.*, 34 (2010) 115-121
88. D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, A. Koziół, K. Matlak, M. Rams, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Zając, J. Korecki, "Thickness-driven Polar Spin Reorientation Transition in Ultrathin Fe/Au(001) Films", *Phys. Rev. B*, 81 (2010) 064421
89. D. Wodka, E. Bielańska, R.P. Socha, M. Elżbieciak-Wodka, J. Gurgul, P. Nowak, "Photocatalytic Activity of Titanium Dioxide Modified by Silver Nanoparticles", *ACS Applied Materials and Interfaces*, 2 (2010) 1945-1953
90. D. Wodka, E. Bielańska, R.P. Socha, P. Nowak, P. Warszyński, "Influence of the Decomposed Substratum on the Photocatalytic Activity of the Titanium Dioxide Modified by Silver Nanoparticles", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 45 (2010) 99-112
91. K. Wojciechowski, M. Kucharek, W. Wróblewski, P. Warszyński, "On the Origin of the Hofmeister Effect in Anion-selective Potentiometric Electrodes with Tetraalkylammonium Salts", *J. Electroanal. Chem.*, 638 (2010) 204-211
92. J. Zawała, R. Todorov, A. Olszewska, D. Exerowa, K. Małysa, "Influence of pH of the BSA Solutions on Velocity of the Rising Bubbles and Stability of the Thin Liquid Films and Foams", *Adsorption*, 16 (2010) 423-435
93. M. Zembala, M. Filek, S. Walas, H. Mrowiec, A. Kornaś, Z. Miszański, H. Hartikainen, "Effect of Selenium on Macro- and Micro-element Distribution and Physiological Parameters of Rape and Wheat Seedlings Exposed to Cadmium Stress", *Plant Soil*, 329 (2010) 457-468
94. A. Zięba, A. Drelinkiewicz, P. Chmielarz, L. Matachowski, J. Stejskal, "Transesterification of Triacetin with Methanol on Various Solid Acid Catalysts. A Role of Catalyst Properties", *Appl. Catal. A*, 387 (2010) 13-25
95. A. Zięba, A. Drelinkiewicz, E.N. Konyushenko, J. Stejskal, "Activity and Stability of Polyaniline-Sulfate-based Solid Acid Catalysts for the Transesterification of Triglycerides and Esterification of Fatty Acids with Methanol", *Appl. Catal. A*, 383 (2010) 169-181



96. A. Zięba, A. Pacuła, A. Drelinkiewicz, "Transesterification of Triglycerides with Methanol Catalysed by Heterogeneous Zinc Hydroxy Nitrate Catalyst. Evaluation of Variables Affecting the Activity and Stability of Catalyst", *Energy Fuels*, 24 (2010) 634–645
97. A. Zięba, L. Matachowski, J. Gurgul, E. Bielańska, A. Drelinkiewicz, "Transesterification Reaction of Triglycerides in the Presence of Ag-Doped  $H_3PW_{12}O_{40}$ ", *J. Mol. Catal. A*, 316 (2010) 30-44
98. A. Zięba, A. Pacuła, E.M. Serwicka, A. Drelinkiewicz, "Transesterification of Triglycerides with Methanol over Thermally Treated  $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \times 2 H_2O$  Salt", *Fuel*, 89 (2010) 1961-1972

### Artykuły ogłoszone elektronicznie

1. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka, "Formaldehyde Activation by Cu(I) and Ag(I) sites in ZSM-5: ETS-NOCV Analysis of Charge Transfer Processes", *Catal. Today*, (2010) DOI: 10.1016/j.cattod.2010.08.020
2. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, E. M. Serwicka, L. Lityńska-Dobrzyńska, "Hydrogenation of Acetophenone in the Presence of Ru Catalysts Supported on Amine Groups Functionalized Polymer", *Catal. Lett.*, (2010) DOI: 10.1007/s10562-010-0448-3
3. A.J. Groszek, E. Lalik, "Effect of Oxygen on the Production of Abnormally High Heats of Interaction with Hydrogen Chemisorbed on Gold", *Appl. Surf. Sci.*, (2010) DOI: 10.1016/j.apsusc.2010.10.138
4. E. Lalik, "Kinetic Analysis of Reduction of  $MoO_3$  to  $MoO_2$ ", *Catal. Today*, (2010) DOI: 10.1016/j.cattod.2010.09.013
5. A. Martínez, E. Peris, M. Derewiński, A. Burkat-Dulak, "Improvement of Catalyst Stability during Methane Dehydroaromatization (MDA) on Mo/HZSM-5 Comprising Intracrystalline Mesopores", *Catal. Today*, (2011) DOI: 10.1016/j.cattod.2010.11.063
6. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, E. Serwicka, "Allylic Oxidation of Cyclohexene Catalyzed by Manganese Porphyrins: DFT Studies", *Catal. Today*, (2010) DOI: 10.1016/j.cattod.2010.09.014
7. N. Spiridis, R.P. Socha, B. Handke, J. Haber, M. Szczepanik, J. Korecki, "Cluster-support Interaction in Au- $Fe_3O_4$  System", *Catal. Today*, (2010) DOI: 10.1016/j.cattod.2010.08.027
8. R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, M. Witko, "Electronic Structure of  $MoO_2$ . DFT Periodic and Cluster Model Studies", *Appl. Catal. A*, (2010) DOI: 10.1016/j.apcata.2010.07.041
9. T.P. Warzocha, T. Pańczyk, P.J. Camp, "Nanocapsule Composed of Carbon Nanotube and Magnetic Nanoparticles. Monte Carlo Studies of its Potential use as a Drug Delivery System", *Science and Supercomputing in Europe*, (2010) [www.hpc-europa.eu/?q=node/119](http://www.hpc-europa.eu/?q=node/119)
10. K. Wojciechowski, A. Bitner, P. Warszyński, M. Zubrowska, "The Hofmeister Effect in zeta Potentials of CTAB-stabilised Toluene-in-water Emulsions", *Colloids Surf.* (2010) DOI: 10.1016/j.colsurfa.2010.09.033

## **ARTYKUŁY W CZASOPISMACH I KSIĄŻKACH O OGRANICZONEJ CYRKULACJI I ARYKUŁY POPULARNO-NAUKOWE**

1. A. Bielański, "Od Krakowa do Lagos. Adam Stanisław Skąpski (1902-1968). Profesor Akademii Górniczo-Hutniczej", *Prace Komisji Historii Nauki PAU*, X (2010) 375-392
2. A. Bielański, "Układ okresowy pierwiastków po 140 latach", *Niedzialki*, 2 (2010) 25-28
3. J. Szaleniec, M. Szaleniec, "Ile jest cukru w jedzeniu?", *Style i Charaktery*, 3 (2010) 65

## **ARTYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH**

1. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, A. Kozłowska, B. Rachwał, "Sorption of Moisture and Dimensional Change of Wood Species Used in Historic Objects", in: "Wood Science for Conservation of Cultural Heritage-Braga 2008: Proc. Int. Conf. COST Action IE0601" (J. Gril, ed.), Firenze University Press, Firenze 2010, p.11-16 [ISBN 978-88-6453-157-1]
2. D. Dronka-Góra, G. Para, R. Skrzela, K.A. Wilk, P. Warszyński, "Adsorpcja surfaktantów i polielektrolitów na granicach faz", in: "Interdyscyplinarność badań naukowych" (J. Szreka, ed.), Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2010, p.34 [ISBN 978-83-7493-520-3]  
[http://ko-oper.pwr.wroc.pl/index.php?option=com\\_content&view=article&id=62&Itemid=75](http://ko-oper.pwr.wroc.pl/index.php?option=com_content&view=article&id=62&Itemid=75)
3. D.C. Hughes, J. Weber, R. Kozłowski, "Roman Cement for the Production of Conservation Mortars", in: "RILEM Proceedings PRO 78, 2nd Historic Mortars Conference & RILEM TC 203-RHM Repair Mortars for Historic Masonry Final Workshop" (J. Valek, C. Groot, J.J. Hughes, eds), Prague 2010 [e-ISBN: 978-2-35158-112]
4. R. Kozłowski, Ł. Bratasz, "Target Microclimates for Preservation of Wooden Object: An Attempt at Standardization", *Proc. Int. Conf. COST Action IE0601* (L. Uzielli, ed.). Firenze University Press, Firenze 2010, p.127-132 [ISBN 978-88-8453-382-1]
5. Ł. Lasyk, M. Łukomski, Ł. Bratasz, "Simple Electronic Speckle Pattern Interferometer (ESPI) for the Investigation of Wooden Art Objects", in: "Wood Science for Conservation of Cultural Heritage-Braga 2008: Proc. Int. Conf. COST Action IE0601" (J. Gril, ed.), Firenze University Press, Firenze 2010, p.11-16 [ISBN 978-88-6453-157-1]
6. Ł. Mokrzycki, T. Machej, M. Zimowska, E.M. Serwicka, "Total Oxidation of Nitrogen Containing Compounds to Harmless Products over Mixed Oxides Catalysts", *Proceedings. 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010* (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.324-327 [ISBN 978-83-929430-4-4]
7. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński, "Colloid Silica Binders Wetting Property Modification in Investment Casting", *Sci. Proc. 7<sup>th</sup> Int. Congr. 'Machines, Technologies, Materials'*, Scientific-Technical Union of Mechanical Engineering, Sofia 2010, year XVIII, vol. 4, p.117-119 [ISSN 1310-3946]
8. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials Based on the Colloidal Molecular Sieves", *Book of Abstracts, XVIIth Zeolite Forum* (M. Zieliński, ed.), Polish Zeolite Association 2010, p.31-33 [ISBN; 978-83-929430-1-3]

9. K. Szczepanowicz, H.J Hoel, G. Gaudernack, P. Warszyński, "Formation of Nanocapsules with Emulsion Core and Pegylated Shell by Polyelectrolyte Multilayer Adsorption" XVIII Int. Conf. on Bioencapsulation, Porto 2010, Ed. Bioencapsulation Research Group, Porto 2010, p.272-273
10. D. Wilk, Ł. Bratasz, R. Kozłowski, "Reducing Shrinkage Cracks in Roman Cement Renders", in: "RILEM Proceedings PRO 78, 2nd Historic Mortars Conference & RILEM TC 203-RHM Repair Mortars for Historic Masonry Final Workshop" (J. Valek, C. Groot, J.J. Hughes, eds), Prague 2010 [e-ISBN: 978-2-35158-112]
11. A. Zięba, L. Matachowski, E. Bielańska, A. Drelinkiewicz, "Transesterification of Castor Oil and Triacetin with Methanol Catalysed by Ag-Salts of 12-Tungstophosphoric acid", Proceedings. 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.292-299 [ISBN 978-83-929430-4-4]
12. A. Zięba, L. Matachowski, E. Lalik, A. Drelinkiewicz, "Solid Potassium and Cesium Salts of 12-Tungstophosphoric Acid as Catalysts for Bio-esters (Biodiesel) Formation", Proceedings. 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.300-307 [ISBN 978-83-929430-4-4]

## **STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH**

1. M. Adamczak, H.J. Hoel, J. Barbasz, P. Warszyński, "Nanocapsules of Polyelectrolytes Labelled with Quantum Dots", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.67
2. M. Adamczak, H.J. Hoel, J. Barbasz, P. Warszyński, Complexes of Polyelectrolytes with Quantum Dots", Book of Abstracts. 3rd Int. NanoBio Conf. NanoBio 2010, Zurich 2010, p.2
3. M. Adamczak, H.J. Hoel, J. Barbasz, P. Warszyński, " Encapsulation of Quantum Dots in Complexes of Polyelectrolytes", Book of Abstracts. 24th Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010, p.P.2.70
4. Z. Adamczyk, "Adsorption of Colloids and Proteins. Facts and Myths", Materiały konferencyjne. Symp.'Zjawiska międzyfazowe wczoraj, dziś, jutro', Lublin 2010, p.15
5. Z. Adamczyk, M. Nattich, J. Barbasz, "Nanoparticle and Protein Deposition on Surfaces", Streszczenia. V Szkoła Letnia dla Doktorantów - Warsztaty Naukowe 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sandomie 2010
6. Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Nattich, J. Barbasz, "Structures of Fibrinogen Layers on Mica Determined by AFM, Streaming Potential and the Colloid Enhancement", Proc. Workshop of COST Action D43, Genova 2010
7. Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Nattich, M. Radziszewska, J. Barbasz, "Fibrinogen Layers on Mica Analyzed by AFM, Streaming Potential and Measurements Colloid Enhancement", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010

8. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Radziszewska, J. Barbasz, "Fibrinogen Adsorption on Mica Studied by AFM, Streaming Potential and Colloid Enhancement", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
9. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Characterization of Colloid Particles Monolayers on Mica by the Streaming Potential Measurements", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
10. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Characterization of Colloid Particles Monolayers on Mica by the Streaming Potential Measurements", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
11. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Zeta Potential of Surfaces Covered by Colloid Particles and Macromolecules Determined by the Streaming Potential Method", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
12. J. Adamski, A. Kiszka, J. Kochana, P. Nowak, A. Parczewski, "Zastosowanie planu Placketta-Burmana do zbadania efektów matrycy w elektrochemicznym oznaczaniu polifenoli w winach", Materiały. VIII Polska Konferencja Chemii Analitycznej 'Analityka dla społeczeństwa XXI wieku', Kraków 2010, p.214
13. J. Adamski, A. Kiszka, J. Kochana, P. Nowak, A. Jarosz-Wilkołazka, "Prosty czujnik elektrochemiczny do oznaczania polifenoli w winach", Materiały. VIII Polska Konf. Chemii Analitycznej 'Analityka dla społeczeństwa XXI wieku', Kraków 2010, p.500
14. M.A. Arribas, A. Burkat-Dulak, A. Martinez, M. Derewiński, "Improved Sulfur Resistance of Pd Nanoparticles Inside the Mesopores of Carbon-templated HZSM-5", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.92 [ISBN 978-83-60514-12-2]
15. M.A. Arribas, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński "The Effect of Confining Pd Nanoparticles Inside the Mesopores of Carbon-templated HZSM-5 on Sulfur Resistance During n-Octane Hydroconversion", Abstracts, 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesoporous Materials Symp. IZC-IMMS 2010 (C. Collela, P. Aprea, B. de Gennaro, B. Liquori, eds.), Sorrento 2010, p.187 [ISBN 978-88-89976-29-6]
16. M.A. Arribas, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński, "The Effect of Confining Pd Nanoparticles Inside the Mesopores of Carbon-templated HZSM-5 on Sulfur Resistance During n-Octane Hydroconversion", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.126-128 [ISBN 978-83-929430-3-7]
17. J. Barbasz, Z. Adamczyk, M. Cieśla, "Kinetics of Fibrinogen Adsorption on Hydrophilic Substrates", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
18. W. Barzyk, A. Pajor, E. Jarek, P. Warszyński, "Molecular Dynamics Simulation of Surface Potential of Nonionic and Ionic Surfactants – Modeling and Experimental Verification", Book of Abstracts. 14th Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.57

19. U. Bazylińska, R. Skrzela, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, K.A. Wilk, "Dye-loaded Polymeric Nanocapsules Obtained in the Layer-by-layer Approach: Properties and Characteristics", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.70
20. E. Brocławik, P.Rejmak, J. Załucka, P.Kozyra M. Mitoraj, J. Datka, "New Insight into Charge Flow Processes upon Activation of Alkenes or Alkynes on Cu(I) and Ag(I) Sites in MFI Zeolite", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.15
21. E. Brocławik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka, "New Insights into Charge Flow Processes and their Impact on the Activation of Ethene and Ethyne by Cu(I) and Ag(I) Sites in MFI", Abstracts CD edition. 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. (16th IZC), Sorrento 2010, abstract 417
22. M. Derewiński, V. Pashkova, P. Sarv, "Assembling Protozeolitic Nanoclusters of MFI Type into a Mesostructured Material of Wormhole-layeres Arrangement and Acidic Properties", Abstracts, 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesostructured Materials Symp. IZC-IMMS 2010 (C. Collela, P. Aprea, B. de Gennaro, B. Liquori, eds.), Sorrento 2010, p.354 [ISBN 978-88-89976-29-6]
23. A. Dobija, W. Nitek, D. Mucha, W. Łasocha, "Synteza i analiza fizykochemiczna nowych peroxomolibdenianów", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.143 [ISBN 978-83-60514-12-2]
24. D. Dronka-Góra, A. Pajor, E. Jarek, G. Para, P. Warszyński, "Surface Properties of Cationic Surfactant Anionic Polyelectrolyte Mixtures", Book of Abstracts.12th Ukrainian-Polish Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and their Technological Applications (E.V. Aksenenko, R. Leboda, J. Narkiewicz-Michalek, Yu. I. Tarasevich, eds), Faculty of Chemistry UMCS, Lublin 2010, p.30 [ISBN: 978-83-227-3180-2]
25. D. Dronka-Góra, A. Pajor, E. Jarek, G. Para, P. Warszyński, "Surface Tension and Surface Potential of DDTABr-PSS Mixtures", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010, p.P2.59
26. D. Dronka-Góra, G. Para, A. Hamerska, K. Wilk, P. Warszyński, "Formation of the Ionic Surfactant - Polyelectrolyte Surface Complexes as the Initial Stage of Nanostructure Building", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.78
27. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, M. Mosiałek, G. Mordarski, "High Temperature Oxide Electrolytes for Electrochemical Devices Application", Proc. 11<sup>th</sup> ECERS Conf. Krakow 2009, p.360-365 [printed 2010]
28. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Mroczkowska, P. Dudek, "Co-Doped Ceria Electrolytes in the CeO<sub>2</sub>-M<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SrO, M=Sm, Gd System", Proc. 9<sup>th</sup> Int. Symp. on Systems with Fast Ionic Transport, Riga 2010

29. \a. Dudzik, M. Szaleniec, A. Salwiński, M. Witko, J. Heider, "Ethylbenzene Dehydrogenase – Stereospecificity and Reaction Mechanism", Book of Abstracts. 17<sup>th</sup> Int. Symp. on Homogeneous Catalysis (M. Dutkiewicz, C. Pietraszuk, A. Schulmann, eds.), Poznań 2010, p.135
30. A. Dudzik, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "(S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase – Stereospecific Reduction of Ketones to Alcohols", Book of Abstracts. 17<sup>th</sup> Int. Symp. on Homogeneous Catalysis (M. Dutkiewicz, C. Pietraszuk, A. Schulmann, eds.), Poznań 2010, p.134
31. R. Dula, A. Michalik-Zym, T. Machej, W. Rojek, E.M. Serwicka, "Katalizatory tlenkowe zawierające mangan do całkowitego spalania metanu", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.45 [ISBN 978-83-60514-12-2]
32. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, E.M. Serwicka. L. Lityńska-Dobrzyńska, "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów rutenowych na nosnikach polimerowych do procesów uwodorniania", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.119 [ISBN 978-83-60514-12-2]
33. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E.M. Serwicka, "Uwodornienie acetofenonu w obecności katalizatorów rutenowych osadzonych na polimerach", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.21 [ISBN 978-83-60514-12-2]
34. J. Dziejczak, D. Kędracki, P. Nowak, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, "Encapsulation of Oxidant Compounds in Application for Removal of Organic Contaminants from Water", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.80
35. J. Dziejczak, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, I. Kumakiri, C. Simon, "Photocatalytic Degradation of the Humic Species as a Method of their Removal from Water", Book of Abstracts. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010, p.19
36. J. Dziejczak, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, J. Kumakiri, C. Simon, "Photocatalytic Degradation of the Humic Species as a Method of their Removal from Water", Abstracts. 4<sup>th</sup> IDECAT Conf. on Catalysis 'Emerging Challenges in Catalysis', Porquerolles 2010, p.50
37. M. Elżbieciak, S. Zapotoczny, D. Wodka, P. Nowak, M. Nowakowska, P. Warszyński, "Effect of the Laponite Nanoparticles on the Thickness and Barrier Properties of the Model Polyelectrolyte Multilayer Films", Book of Abstracts. IVth Int. Conf. on Molecular Materials MOLMAT, Montpellier 2010, p.P205
38. M. Elżbieciak-Wodka, M. Kolasieńska, P. Nowak, P. Warszyński, "Effect of the Ionic Strength and First Anchoring Layer on the Thickness and Permeability of the PAH/PSS Multilayer Films", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.81

39. B. Figarska, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, B. Strzelczyk, K. Matlak, J. Korecki, "Ultrathin FeO and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Oxides on Pt(111)", Program and Abstracts Book. European Conf. on Surface Science ECOSS 27, Groningen 2010, p.221
40. U. Filek, A. Bressel, J. Frey, B. Sulikowski, D. Freude, M. Hunger, "Struktura soli AlPW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> i jej aktywność w eteryfikacji 1-fenylometanolu alkoholami C1- C4", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.138 [ISBN 978-83-60514-12-2]
41. K. Freindl, M. Zając, T. Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, K. Matlak, E. Zackiewicz, E. Partyka-Jankowska, J. Korecki, "Comparison of Oxygen Adsorption on Fe(110) Surface and Fe(110)/W(110) Monolayer", Program and Abstracts Book. European Conf. on Surface Science ECOSS 27, Groningen 2010, p.207
42. B. Jachimska, M. Nosek, P. Kobuz, K. Pamin, J. Połtowicz, R. Grabowski, "Incorporation of Macrocyclic Metallocomplexes into Liposomes: Physicochemical and Catalytic Characterization", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.84
43. B. Jachimska, A. Pajor, "Physico-chemical Characterization of Lysozyme (Conformational Stability, Shape and Effective Charge) and Deposition at Mica Surfaces", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.83
44. B. Jachimska, S. Zapotoczny, "Dendrimers- Reference System for the Studies of Proteins Adsorption", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.82
45. E. Jarek, D. Dronka-Góra, G. Para, P. Warszyński, "Surface Activity of Cationic Surfactant – Anionic Polyelectrolyte Complexes", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.85
46. A. Kalicińska, J. Stefańska, K. Szczepanowicz, S. Tyski, "The Biocidal Activity of Silver Nanoparticles Toward *Pseudomonas aeruginosa* Plankton and Biofilm", Proc. 20<sup>th</sup> European Congr. of Clinical Microbiology and Infectious Diseases, Vienna 2010, p.S569.
47. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, "Transition Metal Substituted Heteropolyacids as Catalysts for Cyclohexene Oxidation", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.95 [ISBN 978-83-60514-12-2]
48. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, "Oxidation of Cyclohexene with Iodosobenzene Diacetate in the Presence of Transition Metal Substituted Polyoxometalates", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.96 [ISBN 978-83-60514-12-2]
49. D. Kędracki, J. Dziejczak, K. Szczepanowicz, P. Nowak, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, "Encapsulation of Oxidant Compounds in Application for Purification of Water", Book of Abstracts. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010, p.28

50. D. Kędracki, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, "Synteza i właściwości kapsulek polielektrolitowych o ciekłym rdzeniu", *Konf. Biomeditech 2010*, Poznań 2010
51. M. Kolasińska, T. Gutberlet, H. Möhwald, R. Krastev, P. Warszyński, "Ordering of Nanoparticles in Polyelectrolyte Multilayers", *Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces'*, Krakow 2010, p.57
52. M. Kolasińska, T. Kruk, K. Szczepanowicz, P. Nowak, P. Warszyński, "Structure and Electrochemical Characterization of Silver Nanoparticles Embedded in Polyelectrolyte Multilayers", *Book of Abstracts. IV<sup>th</sup> Int. Conf. on Molecular Materials MOLMAT*, Montpellier 2010, p.206
53. J. Korecki, "Non-collinear Magnetic Order in Iron Ultra-thin Films and Nanostructures", *Conference Digest. 23<sup>rd</sup> General Conf. of the Condensed Matter Division of the European Physical Society CMD 23*, Warszawa 2010, p.42
54. D. Kosior, J. Zawała, M. Krasowska, K. Małyśa, "Air at Hydrophobic Surfaces and the Three-Phase Contact Formation", *Book of Abstracts. EUFOAM 2010 Conf., & COST D43 Symposium & COST P21 Working Group Meeting*, Borovets 2010, p.P21-P16.
55. A. Kozioł-Rachwał, K. Freindl, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, "Interlayer Magnetic Coupling in Epitaxial Fe/MgO/Fe Trilayers", *Programme and Abstracts Book. Joint European Magnetic Symposia JEMS 2010*, Kraków 2010, p.183
56. P. Kozub, B. Jachimśka, J. Połtowicz, A. Ratusza, "Physicochemical Characterization of Metallocomplexes Encapsulated into Liposomes", *Materiały Zjazdu PTChem i SITPChem*, Gliwice 2010, p.245
57. T. Kruk, R. Socha, P. Nowak, E. Bielańska, K. Szczepanowicz, M. Kolasińska, P. Warszyński, "Preparation and Characterization of Polyelectrolyte Multilayers Containing Silver Nanoparticles", *Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces'*, Krakow 2010, p.94.
58. M. Krzak, G. Mordarski, E. Bielańska, P. Nowak, G. Nawrat, Rhenium and its Alloys as Potential Electrocatalysts in Fuel Cells and in Water Electrolysis", *Abstracts. 4<sup>th</sup> IDECAT Conf. on Catalysis 'Emerging Challenges in Catalysis'*, Porquerolles 2010, p.63
59. M. Krzak, E. Bielańska, P. Nowak, P. Warszyński, "Modification of Epoxy Anticorrosive Coatings with Layered Silicates", *Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces*, Kraków 2010, p.95
60. M. Krzak, G. Mordarski, P. Nowak, V. Pashova, L. Mirkova, M. Monev, "Rhenium Alloys as the Replacements of the Precious Metals in Fuel Cells and in Water Electrolysis", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.93 [ISBN 978-83-60514-12-2]



61. J. Kulbacka, J. Saczko, N. Skońska, M. Majkowski, A. Choromańska, A. Chwilkowska, I. Kamińska, M. Kotulska, B. Jachimska, "Transport via Cell Membrane of the Novel Porphyrins Enhanced by Electroporation in vitro as Anticancer Therapy", Proc. 35<sup>th</sup> Federation of European Biochem. Soc. Congr., Gothenburg 2010, p.208
62. I. Kumakiri, C. Simon, K. Szczepanowicz, D. Wodka, P. Nowak, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszński, "Removal of Natural Organic Matters in Potable Water using Photocatalytic Membrane Reactor", Book of Abstracts. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010, p 31.
63. A. Lewkowicz, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "Struktura elektronowa modelowych układów heteropolikwasów. Badania metodami periodycznymi", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.106 [ISBN 978-83-60514-12-2]
64. A. Lewkowicz, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "Electronic Structure of Model Heteropolyacids and their Salts. Periodic DFT Study", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.35
65. A. Lewkowicz, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "Mechanism of Estrification on Heteropolyacid Catalyst. Theoretical DFT Studies", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.93
66. B. Lis, K. Adamowicz, M. Dudek, M. Mosiałek, G. Mordarski, A. Rapacz-Kmita, M. Krzak, „Nanokrystaliczne materiały w układzie  $Ag/Ce_{1-x}Gd_xO_2$ ,  $0.1 < x < 0.3$ , dla ogniw paliwowych IT-SOFC". "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.119 errata [ISBN 978-83-60514-12-2]
67. K. Łątka, J. Gurgul, A.W. Pacyna, R. Pöttgen, "Electronic and Magnetic Properties of Ternary Stannides  $RERhSn$  (RE = Tb, Dy and Ho)", Book of Abstracts. 17<sup>th</sup> Int. Conf. on Solid Compounds of Transition Elements, Annecy 2010, p.73
68. T. Machej, L. Matachowski, D. Mucha, J. Kryściak-Czerwenka, "Sorpacja tlenków azotu na solach  $Ag_3PW_{12}O_{40}$  i  $Ag_3PMo_{12}O_{40}$  – wpływ atomu addenda (W, Mo)", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.123 [ISBN 978-83-60514-12-2]
69. B. Martins, D. Snihrov, K. Szczepanowicz, P. Warszński M.F. Montemor, "Self-healing Ability of Polyelectrolyte Nanocapsules with Emulsion Core Containing Corrosion Inhibitor for Protection of AA2024 Alloys", Proc. Conf. EIS 2010, Algarve 2010, p.78
70. L. Matachowski, J. Gurgul, D. Mucha, M. Zimowska, R.P. Socha, "Redukcja soli  $Ag_3PW_{12}O_{40}$ ,  $Ag_3PMo_{12}O_{40}$ ,  $Ag_4SiW_{12}O_{40}$  i  $Ag_4SiMo_{12}O_{40}$  w wodorze", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.131 [ISBN 978-83-60514-12-2]
71. A. Michna, Z. Adamczyk, E. Bielańska, M. Oćwieja, "Silver Nanoparticle Monolayers on Poly(ethylene imine) Covered Mica Produced by Colloidal Self-assembly", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.146 [ISBN 978-83-60514-12-2]

72. A. Michna, Z. Adamczyk, E. Bielańska, M. Oćwieja, "Silver Nanoparticle Deposition on Homogeneous Surfaces Produced by Poly(ethylene imine) Adsorption", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
73. A. Michna, M. Oćwieja, "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna suspensji koloidalnych (lateksy, zole metali szlachetnych) dla zastosowań biomedycznych", Materiały. Klaster LifeScience, Kraków 2010
74. J. Mizera, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, R. Socha, R. Grabowski, "Wpływ stopnia utlenienia niklu w układach Au-Ni-O/TiO<sub>2</sub> na ich aktywność katalityczną w reakcji utleniania CO", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.62 [ISBN 978-83-60514-12-2]
75. E. Młyńczak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Giela, A. Kozioł-Rachwał, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Szczepanik, J. Korecki, "Ultrathin MgO Films on Fe(001): Growth, Morphology and Implementation in Magnetic Tunnel Junctions", Programme and Abstracts Book. Joint European Magnetic Symposia JEMS 2010, Kraków 2010, p.187
76. Ł. Mokrzycki, T. Machej, M. Zimowska, E.M. Serwicka, "Total Oxidation of Nitrogen Containing Compounds to Harmless Products over Mixed Oxides Catalysts", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.175-176 [ISBN 978-83-929430-3-7]
77. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski, "Podejścia typu "top-down" oraz "bottom-up" jako metody generowania wtórnego systemu porów i poprawy właściwości katalitycznych materiałów opartych na zeolicie typu ZSM-5", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.139 [ISBN 978-83-60514-12-2]
78. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński, "Improvement of Wetting Properties of Colloid Silica", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.102
79. M. Mosiałek, G. Mordarski. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, "Otrzymywanie i charakterystyka właściwości materiałów katodowych zawierających srebro-Ag/La<sub>0.8</sub>Sr<sub>0.2</sub>MnO<sub>3</sub> i Ag/Sm<sub>0.5</sub>Sr<sub>0.5</sub>CoO<sub>3</sub>", Mater. Konf. Polska Ceramika 2010, Kraków 2010
80. B. Napruszewska, R. Dula, E. M. Serwicka, P. Michorczyk, "Układy tlenkowe pochodzenia hydrotalkitowego jako katalizatory odwodornienia propanu w obecności CO<sub>2</sub>", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.157 errata [ISBN 978-83-60514-12-2]
81. B. Napruszewska, R. Dula, E. M. Serwicka, "Ewolucja termiczna układów typu hydrotalkitu Zn-Mg-Ga-Al", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.158 errata [ISBN 978-83-60514-12-2]

82. M. Nattich, M. Wasilewska, M. Zaucha, "Ilościowy opis kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw nanocząstek, polielektrolitów i białek na powierzchniach stałych - nowe metody elektrokinetyczne", Materiały. Klaster LifeScience, Kraków 2010
83. A. Niecikowska, M. Krasowska, J. Ralston, K. Małyś, "Mutual Interdependences of Electrostatic Interactions and Hydrophobicity for Three Phase Contact Formation at Titania Surface", Abstracts. 27<sup>th</sup> ACSSSC, Roseworthy 2010, p.29
84. A. Niecikowska, J. Zawała, R. Miller, K. Małyś, "Influence of the Dynamic Adsorption Layer Formation on the Rupture Time of Wetting Film on Mica in n-Alkyl-ThrimethylAmmonium Bromides", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.48
85. M. Nosek, K.Pamin, B. Jachimska, J. Połtowicz, R. Grabowski, "Metallocomplexes Incorporated into Liposomes as Catalysts of Hydrocarbons Oxidation", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.97 [ISBN 978-83-60514-12-2]
86. M. Nosek, P. Weroński, J. Barbasz, P. Nowak, G. Mordarski, "Voltammetric Characterisation of Colloidal Particle Monolayer", Book of Abstracts. Workshop & Summer School Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces, Kraków 2010, p.104
87. N. Nosidlak, R.P. Socha, D. Wodka, J. Sanetra, E. Kulig, "The Influence of Dispersed Nanosized Particles on P3OT-Based Photovoltaic Device", Conference Materials. 4<sup>th</sup> Int. Seminar on Modern Polymeric Materials for Enviromental Applications, Krakow 2010, vol.4, p.255-262
88. P. Nowak, "Influence of Surfactant Adsorption on the Leaching of Copper Sulfides", 'Flash memory' Abstracts. 217<sup>th</sup> Meeting of The Electrochemical Society, Vancouver 2010, abstract 1363)  
[www.ecsdl.org/browse/ecs/symp.jsp?Coden=MAECES&Volume=1001](http://www.ecsdl.org/browse/ecs/symp.jsp?Coden=MAECES&Volume=1001)
89. P. Nowak, J. Adamski, J. Kochana, "Simple Sensor with Amperometric Detection Based on Tyrosinase for the Determination of Phenolic Compounds in Water", 'Flash memory' Abstracts. 217<sup>th</sup> Meeting of The Electrochemical Society, Vancouver 2010, abstract 1811  
[www.ecsdl.org/browse/ecs/symp.jsp?Coden=MAECES&Volume=1001](http://www.ecsdl.org/browse/ecs/symp.jsp?Coden=MAECES&Volume=1001)
90. J. Nowicki, B. Sulikowski, M. Muszyński, "Synthesis of New Perfluorinated Surfactants over Different Catalysts Using Fisher Glucosidation", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.183-184 [ISBN 978-83-929430-3-7]
91. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, A. Michna, E. Bielańska, "Self-assembled Silver Nanoparticle Layers of Controlled Density", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
92. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous materials Prepared by Assembling Nanosized Zeolite Seeds", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.103-104 [ISBN 978-83-929430-3-7]

93. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials bBased on the Colloidal Molecular Sieves", Abstracts. 4<sup>th</sup> IDECAT Conf. on Catalysis 'Emerging Challenges in Catalysis', Porquerolles 2010, p.69
94. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchiczne materiały porowate oparte na koloidalnych sitach molekularnych", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.136 [ISBN 978-83-60514-12-2]
95. Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik, L. Fiedor, G. Stochel, "Structural and Electronic Effects on the Reactions of Metallochlorophyll Formation", Book of Abstracts. 5<sup>th</sup> European Conf. 'Chemistry towards Biology', Primosten 2010, p105
96. T. Pańczyk, T.P. Warzocha, "Magnetically Controlled Nanocontainer as a Drug Delivery System: Insights from Monte Carlo Studies", Book of Abstracts. 1<sup>st</sup> World Conf. on Nanomedicine and Drug Delivery (A. George, S. Mathew, eds), Institute of Holistic Medical Sciences, Kottayam 2010, p.50-51
97. A. Pacuła, M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Dudek, R.P. Socha, A. Rapacz-Kmita, "Ceramic Electrolytes in the CeO<sub>2</sub>-BaO-Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System", Mater. CD-rom. 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
98. A. Pacuła, M. Mosiałek, R. Socha, M. Ruggiero, M. Zimowska, P. Nowak, "Electrode Materials Containing Cobalt Species and Nitrogen-doped Carbon Nanotubes", Mater. CD-rom. 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
99. A. Pacuła, K. Uosaki, K. Ikeda, "Synthesis and Characterization of Electroactive Composites Containing Cobalt Species and Nitrogen-doped Nanostructured Carbon", Mater. CD-rom. 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
100. A. Pajor, W. Barzyk, P. Warszyński, "Effect of Electrolytes on Surface Tension and Surface Potential of Solutions of CnTABr Cationic Surfactants", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.106
101. Pajor, B. Jachimska, "Functional Consequence of BSA Heterogeneity", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.140 [ISBN 978-83-60514-12-2]
102. H. Pálková, L. Jankovič, M. Zimowska, J. Madejová, "Dissolution of the Surfactants Modified Montmorillonite in HCl", Proc. 5<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC2010, Acta Mineralogica-Petrographica (E. Pal-Molnar, ed.), 6 (2010) 78, [HU ISSN 0324-6523, HU ISSN 1589-4835]
103. K. Pamin, J. Połtowicz, G. Pozzi, J. Haber, "Wpływ podstawników perfluorowych na właściwości katalityczne i fizykochemiczne kompleksów salenowych", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.98 [ISBN 978-83-60514-12-2]

104. G. Para, A. Hamerska, K. Wilk, Piotr Warszyński, "Mechanism of Cationic Surfactant Adsorption - Influence of Molecular Structure", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.47
105. V.P. Pashova, L.G. Mirkova, M.H. Monev, P. Nowak, "Ni/Re-Co as Electrocatalytic Material for Hydrogen Evolution Reaction in Alkaline Water Electrocatalysis", Book of Abstracts. Sofia Electrochemical Days, Sofia 2010, p.71
106. E. Peris, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński, "The Role of Mesovoids in Carbon-Templated MFI Crystals During Methane Dehydroaromatization (MDA) on Mo/HZSM-5 Catalyst", Abstracts, 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesostructured Materials Symp. IZC-IMMS 2010 (C. Collela, P. Aprea, B. de Gennaro, B. Liquori, eds.), Sorrento 2010, p.253 [ISBN 978-88-89976-29-6]
107. E. Peris, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński, "The Role of Mesovoids in Carbon-templated MFI Crystals During Methane Dehydroaromatization (MDA) on Mo/HZSM-5 Catalyst", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.123-125 [ISBN 978-83-929430-3-7]
108. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Polyelectrolyte/casein Multilayer Films", Streszczenia. V Szkoła Letnia dla Doktorantów - Warsztaty Naukowe 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2010
109. J. Plona, D. Mucha, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E. M. Serwicka, "Wpływ domieszkowania i warunków syntezy na właściwości fizykochemiczne katalizatorów Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> otrzymanych z prekursorów hydrotalkitowych", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.135 [ISBN 978-83-60514-12-2]
110. J. Plona, D. Mucha, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E.M. Serwicka, "Effect of Doping and Synthesis Conditions on the Physicochemical Properties of Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts Obtained from Hydrotalcite-like Precursors", Book of Abstracts., 9<sup>th</sup> Natural Gas Conversion Symp. NGCS 9, NGCS 9, Lyon 2010, p.149
111. J. Plona, D. Mucha, M. Śliwa, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E.M. Serwicka, "Effect of Doping and Synthesis Conditions on the Physicochemical Properties of Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts Obtained from Hydrotalcite-like Precursors", Proceedings' of, ISHC-17 Post Symposium 'Metal Nanoparticles in Catalysis', Wrocław 2010
112. J. Plona, D. Mucha, M. Zimowska, M. Śliwa, R. Grabowski, E.M. Serwicka, "Optymalizacja katalizatora do syntezy metanolu z CO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.91 [ISBN 978-83-60514-12-2]
113. J. Plona, M. Śliwa, D. Mucha, M. Zimowska, R. Dula, R. Grabowski, E.M. Serwicka, "Catalytic Synthesis of Methanol from CO<sub>2</sub> over Layered Double Hydroxide-derived Cu-Zn-Al-Zr-O and Cu-Zn-Al-Ga-O Mixed Oxide Catalysts", Book of Abstracts., 9<sup>th</sup> Natural Gas Conversion Symp. NGCS 9, NGCS 9, Lyon 2010, p.99

114. A. Płazińska, M. Koliński, W. Płaziński, I.W. Wainer, K. Józwiak, "Molecular Docking Study of Stereoisomers of Fenoterol Derivatives to the  $\beta$ 2-Adrenergic Receptor and Molecular Dynamics Simulations for the Selected Agonist- $\beta$ 2-AR Complexes", Book of Abstracts. III Konwersatorium Chemii Medycznej (D. Matosiuk, ed.), Katedra i Zakład Syntezy i Technologii Chemicznej I Środków Leczniczych, Wydział Farmaceutyczny, Uniwersytet Medyczny w Lublinie, Lublin 2010, abstrakt P-41
115. W. Płaziński, W. Rudziński, "Models for Calcium Binding by Polyguluronate Chains. A Molecular Dynamics Study", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Ukrainian-Polish Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and their Technological Applications (E.V. Aksenenko, R. Leboda, J. Narkiewicz-Michalek, Yu. I. Tarasevich, eds), Faculty of Chemistry UMCS, Lublin 2010, p.108 [ISBN: 978-83-227-3180-2]
116. J. Połtowicz, M. Warcholik, R. Karcz, K. Pamin, R. Grabowski, J. Haber, "Porównanie właściwości katalitycznych kationowych kompleksów salenowych i porfiryńowych w reakcji utleniania fenolu", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.99 [ISBN 978-83-60514-12-2]
117. R. Rachwalik, B. Sulikowski, M. Hunger, "Transformations of Monoterpene Hydrocarbons on Ferrierite Type Zeolites", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.143-144 [ISBN 978-83-929430-3-7]
118. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "High Valent Iron-Oxo Complexes with Organic Macrocycles: DFT and Ab initio Study", Book of Abstracts. 9<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry (CESTC 2010) (J. Noga, M. Melicherčík, I. Čerňušák, eds.), Bratislava 2010 [ISBN 978-80-223-2907-1]
119. D. Rutkowska-Żbik, Ł. Orzeł, A. Kania, A. Susz, L. Fiedor, M. Witko, G. Stochel, "Theoretical Investigation of Structural and Electronic Effects in the Metalation of Tetrapyrroles", Conf. Information & Abstracts. Conf. Modeling & Design of Molecular Materials 2010, Wrocław 2010, p.P48
120. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, A. Lewkowicz, R. Gryboś, M. Witko, "Preliminary DFT Calculations on Pt and Pd N-Heterocyclic Carbene Complexes for Methane Activation", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.109 [ISBN 978-83-60514-12-2]
121. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, A. Lewkowicz, R. Gryboś, M. Witko, "DFT Calculations on Noble Metal N-Heterocyclic Carbene Complexes for Methane Activation", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.68
122. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "DFT Studies on Catalytic Oxidation of Cyclohexene on Manganese Porphyrins", Book of Abstracts. 9<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry (CESTC 2010) (J. Noga, M. Melicherčík, I. Čerňušák, eds.), Bratislava 2010, p.50-51 [ISBN 978-80-223-2907-1]

123. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, P. Hejduk, K. Alexopoulos, M.-F. Reyniers, G.B. Marin, P. Sautet, "Metal Oxides for Catalysis", Book of Abstracts. Conf. i-CATs Innovation in Catalysis for Sustainable Production & Energy. Towards a Roadmap for Catalysis, Messina 2010, p.P34
124. K. Sadlej, M.L. Ekiel-Jeżewska, E. Wajnryb, Z. Adamczyk, "Modeling Bio-molecules in Confined-geometry Floks", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
125. R. Skrzela, G. Para, P. Warszyński, K.A. Wilk, "Adsorption of Novel Dicapalic Ammonium Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/water Interface", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010, p.P2.53
126. R.P. Socha, P. Żurek, P. Nowak, "Influence of Doping of TiO<sub>2</sub> with Transition Metal Ions on the Charge-transfer at the TiO<sub>2</sub>/aqueous Electrolyte Interface", Book of Abstracts. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants", Kraków 2010, p.32.
127. M. Szaleniec, T. Borowski, K. Schühle, M. Witko, J. Heider, "Ab initio Modeling of Ethylbenzene Dehydrogenase Reaction Mechanism", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.103 [ISBN 978-83-60514-12-2]
128. M. Szaleniec, T. Borowski, K. Schühle, M. Witko, J. Heider, "Ab initio Modeling of Ethylbenzene Dehydrogenase Reaction Mechanism", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.51
129. M. Szaleniec, A. Dudzik, M. Witko, J. Heider, "(S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase – Stereospecific Reduction of Ketones to Alcohols", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.104 [ISBN 978-83-60514-12-2]
130. J. Szaleniec, M. Wiatr, M. Szaleniec, R. Przekłasa, J. Składzień, "Walidacja zewnętrzna modeli informatycznych prognozujących poprawę słuchu u po operacjach tympanoplastycznych", Mater. Konf. XLIV Zjazd Polskiego Towarzystwa Otolaryngologów Chirurgów Głowy i Szyi & IV Zjazd Polskiego Towarzystwa Chirurgów Podstawy Czaszki, Warszawa 2010, p.26-27
131. K. Szczepanowicz, H.J. Hoel, L. Szyk-Warszyńska, E. Bielańska, A. Bouzga, G. Gaudernack, C. Simon, P. Warszyński, "Preparation of Polyelectrolyte Nanocapsules with Emulsion Cores and their Functionalization by Pegylation and Immobilization of Antibody" Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010, p.P6.12
132. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A.M. Buzga, C. Simon, P. Warszyński, "Silica Sources Hydrolysis as a Mechanism of Microencapsules Formation", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.70
133. K. Szczepanowicz, G. Para, A. Hamerska-Dudra, K. Wilk, P. Warszyński, "The Interfacial Properties of Cationic Surfactants/polyanion Systems", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.69

134. K. Szczepanowicz, G. Para, A. Hamerska-Dudra, K.A. Wilk, P. Warszyński, "Encapsulation of Surfactant-polyelectrolyte Complexes via Sequential Adsorption of Polyelectrolytes", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010, p.P2.24
135. K. Szczepanowicz, L. Szyk-Warszyńska, D. Kędracki, E. Bielańska, P. Warszyński, "Formation of Biocompatible Nanocapsules with Emulsion Core and Pegylated Shell by Polyelectrolyte Multilayer Adsorption", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.60
136. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, P. Warszyński "Thickness and Stability of PLL-casein Multilayers", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.71
137. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, R.P. Socha, P. Warszyński "Polyelectrolyte-casein Films, Formation, Stability and Complexation of Divalent Cations", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Conf. on Interfaces against Pollution IAP 2010, Beijing 2010, p.222
138. L. SzykWarszyńska, J. Piekoszewska, R.P. Socha, P. Warszyński "Formation, Stability of PLL/casein Multilayer Films and their Ability to Bind Divalent Cations", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.110.
139. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński, "Formation of Polyelectrolyte Multilayer Films at Heterogeneous Surfaces". Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.111
140. M. Ślęzak, A. Koziół, K. Matlak, T. Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki, "Growth and Spin Structure of Ultrathin Fe Films on W(110)", 10<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-10), Szklarska Poręba 2010, Bulletin of the of the Polish Synchrotron Radiation Society, 9 (2010) 103 [ISSN 1644-7190]
141. M. Ślęzak, T. Ślęzak, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, K. Freindl, N. Spiridis, E. Partyka-Jankowska, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki, "Non-collinear Magnetization Structure at the Thickness and Temperature Driven Spin Reorientation Transition in Ultrathin Epitaxial Fe Films on W(110)", Programme and Abstracts Book. Joint European Magnetic Symposia JEMS 2010, Kraków 2010, p.108
142. T. Ślęzak, M. Zając, M. Ślęzak, K. Matlak, N. Spiridis, K. Freindl, D. Wilgocka-Ślęzak, R. Ruffer, J. Korecki, "Depth-resolved Magnetization Structure at the Spin Reorientation Transition in Fe/W(110) Ultrathin Films Studied by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", 10<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-10), Szklarska Poręba 2010, Bulletin of the of the Polish Synchrotron Radiation Society, 9 (2010) 72 [ISSN 1644-7190]
143. M. Śliwa, R. Grabowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, "Influence of Metallic Component Modification of Bifunctional Catalysts on its Activity in Direct Synthesis of Dimethyl Ether from Syngas", Book of Abstracts., 9<sup>th</sup> Natural Gas Conversion Symp. NGCS 9, NGCS 9, Lyon 2010, p.156



144. M. Śliwa, R. Grabowski, M. Zimowska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, "Wpływ modyfikacji składowej metalicznej katalizatora bifunkcyjnego na jego właściwości fizykochemiczne oraz aktywność w procesie jednoetapowej syntezy eteru dimetylowego z gazu syntezowego", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.75 [ISBN 978-83-60514-12-2]
145. R. Tokarz-Sobieraj, "Quantum-chemical Description of Active Sites in Molybdenum Based Catalysts", Abstracts. 6<sup>th</sup> EFCATS Summer School 'Catalysis & Surface Science for Renewables & Energy', Izmir 2010
146. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, A. Lewkowicz, M. Witko, "Wpływ otoczenia na strukturę elektronową centrów aktywnych w heteropolikwasach i tlenku molibdenu(VI)", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.115 [ISBN 978-83-60514-12-2]
147. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, A. Lewkowicz, M. Witko, "Electronic Structure of the Active Centers in Molybdenum Heteropolyacid and Oxide. Cluster DFT Studies", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.115
148. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, "Deposition of Core-polyelectrolyte Shell Structures at Heterogeneous Surfaces Modified by Polyelectrolyte Multilayers", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.112
149. P. Warszyński, P. Dyshlovenko, P. Dejardin, "Electrostatic Interactions between Spherical Particle with Dipolar Charge Distribution and Charged Surface", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.76
150. P. Warszyński, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska, M. Elżbieciak, K. Szczepanowicz, J. Piekoszewska, A. Trybała, J. Superata "Functional Multilayer Films, Properties and Applications", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.44
151. T.P. Warzocha, T. Pańczyk, W. Rudziński, "Influence of the Structure of a 'Nanocapsule' on its Properties and Behaviour under External Magnetic Field: Monte Carlo Study", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Ukrainian-Polish Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and their Technological Applications (E.V. Aksenenko, R. Lebeda, J. Narkiewicz-Michalek, Yu. I. Tarasevich, eds), Faculty of Chemistry UMCS, Lublin 2010, p.183 [ISBN: 978-83-227-3180-2]
152. P. Weroński, "From Randomness to Order: Modeling of Deposition of Colloid Particles", Book of Abstracts. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010, p.45
153. A. Węgrzynowicz, M. Derewiński, "Eliminacja defektów/pęknięć w wysokokrzemowych membranach zeolitowych typu MFI", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.134 [ISBN 978-83-60514-12-2]

154. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, "Variety of Active Centers at Surfaces of V-O and Mo-O Oxides", Book of Abstracts. 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010, p.23
155. D. Wodka, E. Bielańska, R. P. Socha, M. Elżbieciak, J. Gurgul, P. Nowak, P. Warszyński, I. Kumakiri, "Photocatalytic Activity of Titanium Dioxide Modified by Silver Nanoparticles", Book of Abstracts. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants", Kraków 2010, p.18
156. D. Wodka, I. Kumakiri, J. Dziedzic, D. Kędracki, L. Szyk-Warszyńska, P. Nowak, C. Simon, P. Warszyński, "Hybrid Photocatalytic-Membrane Technique for Removal of Natural Organic Matter from Potable Water", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Int. Conf. on Interfaces against Pollution IAP 2010, Beijing 2010, p.98
157. D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, I. Kumakiri, "Photocatalytic Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment – Preparation and Testing of the Photo-Catalyst", Book of Abstracts. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010, p.34
158. E. Zackiewicz, R.P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki, "Rola prekursora w osadzaniu bimetalicznego katalizatora modelowego Au-Fe na TiO<sub>2</sub>(110)", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IKiFP PAN, Kraków 2010, p.151 [ISBN 978-83-60514-12-2]
159. E. Zackiewicz, R.P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki, "STM and XPS Studies of bi-Metallic Au-Fe Clusters on TiO<sub>2</sub>(110)", Program and Abstracts Book. European Conf. on Surface Science ECOSS 27, Groningen 2010, p.221
160. E. Zackiewicz, R.P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki, "Badania STM i XPS modelowego katalizatora Au-Fe na TiO<sub>2</sub>(110)", Streszczenia. VI Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2010', Zakopane 2010, p.31
161. J. Zawła, K. Małysa, "Influence of the Liquid Film Dimensions on the Bubble Bouncing from Various Interfaces", Book of Abstracts. 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010, p.73
162. J. Zawła, K. Małysa, "Interrelation of Impact Velocity, Size of the Liquid Film Formed and Lifetime of the Bubble at Liquid/Gas Interface", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010, p.O4.3
163. J. Zawła, D. Terwagne, S. Dorbolo, N. Vandewalle, K. Małysa, "On Mechanism of the Bubble and Droplet Bouncing from the Liquid/gas Interface", Book of Abstracts. EUFOAM 2010 Conf., & COST D43 Symposium & COST P21 Working Group Meeting, Borovets 2010, p.P21-6
164. M. Zając, T. Ślęzak, M. Ślęzak, K. Freindl, P. Cierniak, E. Partyka-Jankowska, J. Korecki, "In situ High Temperature Magnetic and Dynamic Properties of Fe(110) Nanostructures Studied with Nuclear Resonant Scattering Techniques", 10<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-10), Szklarska Poręba 2010, Bulletin of the of the Polish Synchrotron Radiation Society, 9 (2010) 86 [ISSN 1644-7190]

165. A. Zięba, L. Matachowski, E. Bielańska, A. Drelinkiewicz, "Transesterification of Castor Oil and Triacetin with Methanol Catalysed by Ag-Salts of 12-Tungstophosphoric acid", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.163-164 [ISBN 978-83-929430-3-7]
166. A. Zięba, L. Matachowski, A. Drelinkiewicz, "Sole Cs<sub>x</sub>H<sub>3-x</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> jako katalizatory kwasowe w reakcjach odwodnienia etanolu i transestryfikacji triglicerydów metanolem", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.90 [ISBN 978-83-60514-12-2]
167. A. Zięba, L. Matachowski, E. Lalik, A. Drelinkiewicz, "Solid Potassium and Cesium Salts of 12-Tungstophosphoric Acid as Catalysts for Bio-esters (Biodiesel) Formation", Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010 (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds.), Polish Zeolite Association, p.165-166 [ISBN 978-83-929430-3-7]
168. A. Zięba, A. Pacuła, A. Drelinkiewicz, "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności Zn<sub>5</sub>(OH)<sub>8</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> x 2 H<sub>2</sub>O", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.89 [ISBN 978-83-60514-12-2]
169. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, R. Dula, E.M. Serwicka, "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów rutenowych na nośnikach tlenkowych do procesów uwodornienia", "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.126 [ISBN 978-83-60514-12-2]
170. M. Zimowska, B.D. Napruszewska, R. Dula, D. Mucha, E.M. Serwicka, "Kinetics of Zn-Al Hydrotalcite Structure Reconstruction Process", Proc. 5<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC2010, Acta Mineralogica-Petrographica (E. Pal-Molnar, ed.), 6 (2010) 853, [HU ISSN 0324-6523, HU ISSN 1589-4835]
171. M. Zimowska, H. Pálková, E. Bielańska, L. Lityńska-Dobrzyńska, Z. Olejniczak, J. Madejová, E.M. Serwicka, "Nowe porowate heterostruktury ilaste (PCH) na osnowie Laponitu", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds.), IkiFP PAN, Kraków 2010, p.13 [ISBN 978-83-60514-12-2]

## INNE OPRACOWANIA

1. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, European Standard EN 15758:2010, Conservation of Cultural Property - Procedures and instruments for measuring temperatures of the air and the surfaces of objects (udział w opracowaniu)
2. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, European Standard EN 15757:2010, Conservation of Cultural Property - Specifications for temperature and relative humidity to limit climate-induced damage in organic hygroscopic materials (udział w opracowaniu)
3. A. Drelinkiewicz, R. Kosydar, "Hydrogenation of Amylanthraquinone in the Presence of Palladium Catalysts", raport dla Solvay Research & Technology, Brussels

4. E. Serwicka-Bahranowska, "Sorbent nanostrukturalny do likwidacji skażeń chemicznych", raport z projektu 0R00003605 realizowanego z Wojskowym Instytutem Chemii i Radiometrii oraz przedsiębiorstwem Ravimed

#### Opracowania Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ:

1. Uzyskanie akredytacji przez laboratorium CezaŚ
2. Certyfikat Akredytacji Laboratorium Badawczego Nr AB 1221, wystawiony przez Polskie Centrum Akredytacji, Warszawa 7.09.2010
3. J. Kryściak-Czerwenka, opracowanie czwartego wydania procedury ogólnej PO-07 "Oferty, zlecenia, i współpraca ze zlecniodawcą"
4. J. Janas, J. Kryściak-Czerwenka, edycja i korekta procedury badawczej PB-03 (wydanie trzecie) "Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą chromatografii gazowej z detekcją fotojonizacyjną w warunkach in-situ za pomocą chromatografu gazowego Voyager"
5. J. Kryściak-Czerwenka, opracowanie instrukcji działania, wydanie 1:
  - ID-11 "Transport i konserwacja wyposażenia pomiarowo-badawczego"
  - ID-12 "Termohigrometr"
  - ID-13 "Przeliczanie wartości stężeń"
6. J. Kryściak-Czerwenka, opracowanie nowego załącznika do procedury ogólnej Z-4/PO-02 "Zakres obowiązków, odpowiedzialności i uprawnień pracownika CezaŚ"

#### **Ekspertyzy**

1. M. Łukomski, Ł. Lasyk, "Analiza stanu zachowania polichromii i ocena skuteczności zastosowanych działań konserwatorskich", dla "Monument Service - Marcin Kosarzewski" w ramach projektu EEA "Ratunkowe prace konserwatorskie krużganków Zamku Lidzbarskiego"

#### **ARTYKUŁY W DRUKU**

1. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Colloid Enhancement of Protein Layers: Fibrinogen on Mica", J. Colloid Interface Sci., (in press)
2. M. Góral, M. Jouini, C. Perruchot, K. Miecznikowski, I.A. Rutkowska, P.J. Kulesza, "Integration of Vanadium-mixed Addenda Dawson Heteropolytungstate within Poly(3, 4-ethylenedioxythiophene) and Poly(2, 2'-bithiophene) Films by Electrodeposition from the Nonionic Micellar Aqueous Medium", Electrochimica Acta, 2010, (in press)
3. R. Grabowski, J. Słoczyński, M. Śliwa, D. Mucha, R. Socha, J. Skrzypek, M. Lachowska, "Influence of Polymorphic ZrO<sub>2</sub> Phases and the Silver Electronic State on the Activity of Ag/ZrO<sub>2</sub> Catalysts in the Hydrogenation of CO<sub>2</sub> to Methanol", ACS Catalysis (in press)
4. J. Janas, S. Dźwigaj, "Physico-chemical Properties of FeAlBEA and FeSiBEA Zeolites and their Catalytic Activity in the SCR of NO with Ethanol and Methane", Catal. Today, 2010, (in press)
5. M. Krasowska, M. Ferrari, L. Liggieri, K. Małysa, "Influence of n-Hexanol and n-Octanol on Wetting Properties and Air Entrapment at Superhydrophobic Surfaces", Phys Chem. Chem. Phys., (in press)

6. D. Majda, A. Korobov, B. Sulikowski, U. Filek; P. Midgley, D. Nicol, "Low-temperature Thermal Decomposition of Crystalline Partly and Completely Deuterated Ammonium Perchlorate", Chem. Phys. Lett., (in press)
7. K. Małyśa, J. Zawąła, M. Krzan, M. Krasowska, "Bubble rising in Solutions, Local and Terminal Velocities, Shape Variations and Collisions with Free Surface", in: "Drop and Bubble Interfaces", Brill Publishers, Leiden (in press)
8. M. Nattich, Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Radziszewska "Detection of Fibrinogen Monolayers on Mica by the Colloid Enhancement", Env. Biotechnol., (in press)
9. J. Połtowicz, K. Pamin, B. Jachimśka, K. Onik, R. Grabowski, "Macrocyclic Complexes on Natural Polysaccharides as Catalysts in Oxidation of Cyclooctane", Catal. Today (in press)
10. J. Słoczyński, B. Grzybowski, A. Kozłowski, K. Samson, R. Grabowski, A. Kotarba, M. Hermanowska, "Effect of Potassium on Physicochemical Properties of  $\text{CrO}_x/\text{Al}_2\text{O}_3$  and  $\text{CrO}_x/\text{TiO}_2$  Catalysts for Oxidative Dehydrogenation of Isobutane: The Role of Oxygen Chemisorption", Catal. Today (in press)
11. J. Szaleniec, M. Wiatr, M. Szaleniec, J. Składzień, J. Tomik, P. Stręk, R. Tadeusiewicz, R. Przekłasa, "Model choroby jako narzędzie lekarza XXI wieku – przydatność metod sztucznej inteligencji w medycynie na przykładzie sztucznych sieci neuronowych", in: "Elementy Informatyki Medycznej: Ścieżki kliniczne, Wirtualny pacjent, Telekonsultacja" (I. Rotterman-Konieczna, ed.), (in press)
12. M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Fibrinogen Adsorption on Mica Studied by AFM and in Situ Streaming Potential Measurements", Langmuir, (in press)
13. J. Zawąła, K. Małyśa, "Influence of the Impact Velocity and Size of the Film Formed on Bubble Coalescence Time at Water Surface", Langmuir (in press)

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

1. "XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 15-17.03.2010 Kraków - Nowe procesy katalityczne" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, eds), IkiFP PAN, Kraków 2010. pp.174 [ISBN 978-83-60514-12-2]
2. "Book of Abstracts, 10<sup>th</sup> Pannonian International Symposium on Catalysis, August 29<sup>th</sup>-September 2<sup>nd</sup>, 2010, Krakow", (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds), Polish Zeolite Association, Krakow 2010, pp.194 [ISBN 978-83-929430-3-7]
3. "Proceedings, 10<sup>th</sup> Pannonian International Symposium on Catalysis. August 29<sup>th</sup>-September 2<sup>nd</sup>, 2010, Krakow", (M. Derewiński, B. Sulikowski, A. Węgrzynowicz, eds), Polish Zeolite Association, Krakow 2010, pp.360 [ISBN 978-83-929430-4-4]
4. "Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowłach zabytkowych i muzeach" (R. Kozłowski, Ł. Bratasz, eds), Projekt Mechanizmu Finansowego EOG 'Opracowanie norm dopuszczalnych wahań mikroklimatu w otoczeniu drewna polichromowanego' Kraków 2010

## **OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ**

### **PATENTY OTRZYMANE**

1. K. Bahranowski, E. Serwicka-Bahranowska, T. Machej, A. Michalik, R. Janik, H. Piekarska-Sadowska, J. Janas, "Sposób suszenia zmodyfikowanego montmorillonitu jako nośnika katalizatora palladowego do utleniania zanieczyszczeń organicznych zawierających chlor", patent wg zgłoszenia P-362182 (19.11.2010)

### **ZGŁOSZENIA PATENTOWE**

1. I. Kumakiri, R. Bredesen, P. Warszński, P. Nowak, Y. Juan, C. Simon, "Process and System for Removal of Organics in Liquids", zgłoszenie patentowe WIPO, PCT/WO2010/021552 (25.02.2010)
2. T. Machej, G. Wielgosiński, A. Grochowalski, T. Pająk, W. Ćwiakalski, R.W. Łoziński, E. Serwicka-Bahranowska, "Sposób wytwarzania katalizatora wanadowo-wolframowego do destrukcji związków organicznych zawierających chlor, a zwłaszcza dioksyn i furanów", zgłoszenie patentowe P-392503 (24.09.2010)

## UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

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

1. Z. Adamczyk, "Adsorption of Colloids and Proteins. Facts and Myths", Symp. 'Zjawiska międzyfazowe wczoraj, dziś, jutro', Lublin 2010
2. Z. Adamczyk, M. Nattich, J. Barbasz, "Nanoparticle and Protein Deposition on Surfaces", V Szkoła Letnia dla Doktorantów - Warsztaty Naukowe 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sudomie 2010
3. Ł. Bratasz, D. Wilk, "Fizykochemiczna analiza powstawania spękań w zaprawach zabytkowych" X Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków', Warszawa 2010
4. Ł. Bratasz, "Model Framework for Advanced Education", Workshop European Network on Education in Conservation-Restoration, Wien 2010
5. Ł. Bratasz, "Impact of Climate Change on Clay and Organic Materials" European Course 'Management and Protection of Cultural Heritage Facing Climate Change', Ravello 2010
6. E. Broclawik, P. Rejmak, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka, "New Insight into Charge Flow Processes upon Activation of Alkenes or Alkynes on Cu(I) and Ag(I) Sites in MFI Zeolite", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
7. M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials", Pre-Conference School of IZC-IMMS2010 'Advanced Ordered Porous Materials and their Potential Applications', Salerno 2010
8. J. Korecki, "Non-collinear Magnetic Order in Iron Ultra-thin Films and Nanostructures", 23<sup>rd</sup> General Conf. of the Condensed Matter Division of the European Physical Society CMD 23, Warszawa 2010
9. R. Kozłowski, "Impact of Climate Change of Historic Wooden Structures", WTA-2010 Colloquium 'Effect of Climate Change on Built Heritage', Eindhoven 2010
10. R. Kozłowski, "Climate Change Effects on Europe's Cultural Heritage: Challenges and Possibilities", 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków 2010
11. R. Kozłowski, "Wpływ zmiany klimatu na dziedzictwo kulturowe Europy: wyzwania i perspektywy", X Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków', Warszawa 2010
12. K. Małysa, "Thin Liquid Films in Bubble Coalescence and the Three Phase Contact Formation", Int. Conf. on 90th Birthday of A. Scheludko, Sofia 2010
13. M. Oszejca, M. Grzesiak, K. Podulka, A. Rafalska-Lasocha, W. Łasocha "X-ray Powder Diffractometry for Studies of Historical Objects - A New Equipment at Faculty of Chemistry Jagiellonian University", 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków 2010

14. T. Pańczyk, T.P. Warzocha, "Magnetically Controlled Nanocontainer as a Drug Delivery System: Insights from Monte Carlo Studies", 1<sup>st</sup> World Conf. on Nanomedicine and Drug Delivery, Kottayam 2010
15. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "DFT and Ab Initio Studies of Biologically Relevant Iron Sites", GOA Midterm Meeting - Multicenter Quantum Chemistry, Vaalbeek 2010
16. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, "X-Ray Diffraction in Investigations of the Objects of Cultural Heritage", Int. School Hubert Curien 'Structural and Molecular Archaeology' & 3<sup>rd</sup> Course 'Nono-invasive Analysis of Paintin Materials', Erice 2010
17. K. Sadlej, M.L. Ekiel-Jeżewska, E. Wajnryb, Z. Adamczyk, "Modeling Bio-molecules in Confined-geometry Floks", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
18. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, K. Schühle, J. Heider, "The Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase – Is the Theoretical Modeling a Reliable Tool for Prediction of the Enzyme Activity?", Hirschegg Summer School, Hirschegg 2010
19. R. Tokarz-Sobieraj, "Quantum-chemical Description of Active Sites in Molybdenum Based Catalysts", 6<sup>th</sup> EFCATS Summer School 'Catalysis & Surface Science for Renewables & Energy", Izmir 2010
20. M. Witko, "Theory as a Tool to Study Metal-oxide Based Catalyst", Conf, i-CATs Innovation in Catalysis for Sustainable Production & Energy. Towards a Roadmap for Catalysis, Messina 2010
21. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, "Variety of Active Centers at Surfaces of V-O and Mo-O Oxides", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
22. D. Wodka, I. Kumakiri, J. Dziedzic, D. Kędracki, L. Szyk-Warszyńska, P.Nowak, C. Simon, P. Warszyński, "Hybrid Photocatalytic-Membrane Technique for Removal of Natural Organic Matter from Potable Water", 6<sup>th</sup> Int. Conf. on Interfaces against Pollution IAP 2010, Beijing 2010
23. P. Warszyński, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska, M. Elźbieciak, K. Szczepanowicz, J. Piekoszewska, A. Trybała, J. Superata "Functional Multilayer Films, Properties and Applications", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010

## REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Zeta Potential of Substrates Covered by Colloid Particles - A Streaming Potential Study", Int. Electrokinetic Conf., Turku 2010
2. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Zeta Potential of Surfaces Covered by Colloid Particles and Macromolecules Determined by the Streaming Potential Method", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010



3. J. Barbasz, Z. Adamczyk, M. Cieśla, "Kinetics of Fibrinogen Adsorption on Hydrophilic Substrates", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
4. T. Borowski, Mechanizmy reakcji enzymów zależnych od Fe(II) i  $\alpha$ -ketoglutaranu – badania teoretyczne", Seminarium Klaster LifeScience, Kraków 2010
5. T. Borowski, V. Georgiev, A. Wójcik, E. Broclawik, P.E.M. Siegbahn, "DFT Studies on the Reaction Mechanisms of Intra- and Extradiol Dioxygenases", Conf. 'Modeling and Design of Molecular Materials', Wroclaw 2010
6. T. Borowski, V. Georgiev, A. Wójcik, E. Broclawik, P.E.M. Siegbahn, "DFT Studies on the Reaction Mechanisms of Intra- and Extradiol Dioxygenases", Pacificchem 2010 Congr., Honolulu 2010
7. Ł. Bratasz, "Acceptable and Non-acceptable Microclimate Variability: The Case of Wood", Workshop COST Action D42, Caen 2010
8. Ł. Bratasz, B. Rachwał, "Czy istnieją bezpieczne fluktuacje wilgotności względnej?", Konf. 'Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach', Warszawa 2010
9. Ł. Bratasz, B. Rachwał, "Computer Modelling of Dimensional Response and Stress Fields in Wooden Artworks", Workshop COST Action 0601 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo 2010
10. Ł. Bratasz, B. Rachwał, Ł. Lasyk, M. Łukomski, R. Kozłowski, "Fatigue Fracture of Painted Wood Due to Repeated Humidity Variations", Workshop COST Action IE06014<sup>th</sup> & 4<sup>th</sup> Int Conf. 'Interaction Between Wood Science and Conservation of Cultural Heritage', Izmir 2010
11. E. Broclawik, P.Rejmak, J. Załucka, P.Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka, "ETS-NOCV (Natural Orbitals for Chemical Valence) Perspective: New Insights into Substrate Activation on Metal Sites in Zeolites", Pacificchem 2010 Congr., Honolulu 2010
12. M. Derewiński, V. Pashkova, P. Sarv, "Assembling Protozeolitic Nanoclusters of MFI Type into a Mesostructured Material of Wormhole-layeres Arrangement and Acidic Properties", 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesostructured Materials Symp. IZC-IMMS 2010, Sorrento 2010
13. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E.M. Serwicka, "Uwodornienie acetofenonu w obecności katalizatorów rutenowych osadzonych na polimerach", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
14. J. Dziedzic, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, I. Kumakiri, C. Simon, "Photocatalytic Degradation of the Humic Species as a Method of their Removal from Water", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010

15. R. Gryboś, T. Kasza, M. Witko, "Photocatalysis in Space Exploration: Water Dissociation in the Moon Base.", Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010
16. M. Grzesiak, M. Oszejca, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, "Zastosowanie analizy mikrodyfrakcyjnej do badań pigmentów", X Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków', Warszawa, 2010
17. B. Jachimska "Dendrymery - układ referencyjny dla białek", Seminarium Klaster Life Science, Kraków 2010
18. D. Kędracki, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, "Synteza i właściwości kapsulek polielektrolitowych o ciekłym rdzeniu", Konf. Biomeditech 2010, Poznań
19. M. Kolaszińska, T. Gutberlet, H. Möhwald, R. Krastev, P. Warszyński, "Ordering of Nanoparticles in Polyelectrolyte Multilayers", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
20. R. Kozłowski, "Standardisation Activity on the Protection of Sensitive Materials Like Wood within CEN Technical Committee 346", Workshop COST Action 0601 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo 2010
21. R. Kozłowski, "Strategie ochrony: międzynarodowe normy i zalecenia", Warsztat 'Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach', Warszawa 2010
22. M. Krzan, A. Olszewska, E. Jarek, P. Warszyński, K. Małyś, "Wpływ pH na profile prędkości pęcherzyków w roztworach kwasów n-oktylowego i n-dodecyłowego" GDRE Workshop Meeting, Białka Tatrzańska 2010
23. A. Lewkowicz, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "Electronic Structure of Model Heteropolyacids and their Salts. Periodic DFT Study", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
24. M. Łukomski, "Fatigue Fracture of Paint Layers from Repeated Cycles of Humidity Fluctuations", Workshop COST Action IE0601 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo 2010
25. M. Łukomski, "Zagrożenia drewna polichromowanego przez fluktuacje wilgotności względnej", Konf. 'Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach', Warszawa 2010
26. M. Łukomski, "Nowoczesne metody śledzenia rozwoju mikrouszkodzeń: badania średniowiecznego ołtarza w kościele w Hedalen w Norwegii oraz malarstwa tablicowego ze zbiorów Muzeum Narodowego w Krakowie", Konf. 'Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach', Warszawa 2010
27. M. Łukomski, Ł. Lasyk, Ł. Bratasz, "Digital Speckle Pattern Interferometry (DSPI) in Analysis of the Climate-induced Damage of Painted Wood Surfaces", 14<sup>th</sup> Int. Conf. on Laser Optics, St.Petersburg 2010

28. E. Madej, R.P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki, "Badania STM i XPS modelowego katalizatora Au-Fe na TiO<sub>2</sub>(110)", VI Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2010", Zakopane 2010
29. A. Michna, Z. Adamczyk, E. Bielańska, M. Oćwieja, "Silver Nanoparticle Deposition on Homogeneous Surfaces Produced by Poly(ethylene imine) Adsorption", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
30. A. Michna, M. Oćwieja, "Synteza i charakterystyka fizykochemiczna suspensji koloidalnych (lateksy, zole metali szlachetnych) dla zastosowań biomedycznych", Seminarium Klaster LifeScience, Kraków 2010
31. J. Mizera, R. Grabowski, R.P. Socha, M. Zimowiska, N. Spiridis, "Nickel Oxidation State in Au-NiO/TiO<sub>2</sub> Systems and its Influence on the Catalytic Activity in CO Oxidation", COST D36 Working Group 3 Meeting, Sibiu 2010
32. M. Nattich, M. Wasilewska, M. Zaucha "Ilościowy opis kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw nanocząstek, polielektrolitów i białek na powierzchniach stałych - nowe metody elektrokinetyczne", Seminarium Klaster LifeScience, Kraków 2010
33. A. Niecikowska, M. Krasowska, J. Ralston, K. Małysa, "Mutual Interdependences of Electrostatic Interactions and Hydrophobicity for Three Phase Contact Formation at Titania Surface", 27<sup>th</sup> ACS SSC, Roseworthy 2010
34. A. Niecikowska, J. Zawala, R. Miller, K. Małysa, "Influence of the Dynamic Adsorption Layer Formation on the Rupture Time of Wetting Film on Mica in n-Alkyl-ThrimethylAmmonium Bromides", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
35. N. Nosidlak, R.P. Socha, D. Wodka, J. Sanetra, E. Kulig, ""The Influence of Dispersed Nano-sized Particles on P3OT-Based Photovoltaic Device", 4<sup>th</sup> Int. Seminar on Modern Polymeric Materials for Enviromental Applications, Krakow 2010
36. P. Nowak, "Influence of Surfactant Adsorption on the Leaching of Copper Sulfides", 217<sup>th</sup> Meeting of The Electrochemical Society, Vancouver 2010
37. P. Nowak, "Electrical Double Layer at the Copper Sulfide/aqueous Solution Interface", XLVII Annual Symposium 'Physicochemical Problems of Mineral Processing' Witaszyce 2010
38. P. Nowak, "Elektrokataliza w ogniwach paliwowych", III Szkoła Letnia Polskiego Stowarzyszenia Wodoru i Ogniwo Paliwowych, Kraków 2010
39. A. Olszewska, M. Krzan, P. Warszyński, K. Małysa, "Stabilność warstw fosfolipidowych (DLPC i DPPE) nanoszonych na różne podkłady (szkło, krzem i mika)", GDRE Workshop Meeting, Białka Tatrzańska 2010
40. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials Based on the Colloidal Molecular Sieves", XVII<sup>th</sup> Zeolite Forum, Będlewo 2010

41. H. Pálková, L. Jankovič, M. Zimowska, J. Madejová, "Dissolution of the Surfactants Modified Montmorillonite in HCl", 5<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC2010, Budapest 2010
42. G. Para, A. Hamerska, K. Wilk, Piotr Warszyński, "Mechanism of Cationic Surfactant Adsorption - Influence of Molecular Structure", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
43. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Polyelectrolyte/casein Multilayer Films", V Szkoła Letnia dla Doktorantów - Warsztaty Naukowe 'Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce', Sandomie 2010
44. J. Plona, D. Mucha, M. Śliwa, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E.M. Serwicka, "Effect of Doping and Synthesis Conditions on the Physicochemical Properties of Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts Obtained from Hydrotalcite-like Precursors", ISHC-17 Post Symposium 'Metal Nanoparticles in Catalysis', Wrocław 2010
45. J. Plona, M. Śliwa, D. Mucha, M. Zimowska, R. Dula, R. Grabowski, E. M. Serwicka, "Catalytic Synthesis of Methanol from CO<sub>2</sub> over Layered Double Hydroxide-derived Cu-Zn-Al-Zr-O and Cu-Zn-Al-Ga-O Mixed Oxide Catalysts", 9th Natural Gas Conversion Symp. NGCS 9, Lyon 2010
46. J. Plona, M. Śliwa, A. Pacuła, D. Mucha, D. Napruszewska, R. Dula, R. Grabowski, E.M. Serwicka, "Wielofunkcyjne katalizatory na podstawie minerałów warstwowych do jednoetapowego procesu: gaz syntezowy → metanol → eter dimetylowy", Konf. 'Chemia węgla', Wisła, 2010
47. W. Płaziński, W. Rudziński, "Models for Calcium Binding by Polygluronate Chains. A Molecular Dynamics Study", 12<sup>th</sup> Ukrainian-Polish Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and their Technological Applications, Ameliówka 2010
48. W. Rudziński, "Chemia teoretyczna powierzchni – dziedzictwo myśli prof. Waksmundzkiego". Symp. 'Zjawiska międzyfazowe wczoraj, dziś, jutro', Lublin 2010
49. D. Rutkowska-Żbik, "Kwantowo-chemiczne modelowanie właściwości metaloporfiryn", Seminarium Klaster LifeScience, Kraków 2010
50. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "DFT Studies on Catalytic Oxidation of Cyclohexene on Manganese Porphyrins", 9<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry (CESTC 2010), Novy Smokovec 2010
51. P.E.M. Siegbahn, T. Borowski, "Comparison of QM-only and QM/MM Models for the Mechanism of Tyrosinase", Faraday Discussion 148, Cambridge 2010
52. R.P. Socha, P. Żurek, P. Nowak, "Influence of Doping of TiO<sub>2</sub> with Transition Metal Ions on the Charge-transfer at the TiO<sub>2</sub>/aqueous Electrolyte Interface", Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants", Kraków 2010
53. M. Szaleniec, A. Dudzik, "Biokatalityczna synteza optycznie czystych alkoholi alkiloaromatycznych przez dehydrogenazę etylobenzenową i dehydrogenazę fenyletanolową – teoria i eksperyment", Seminarium Klaster LifeScience, Kraków 2010

54. M. Szaleniec, A. Dudzik, "Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych", Sesja Sprawozdawcza Projektu PO IG BIOTRANSFORMACJE, Szklarska Poręba 2010
55. J. Szaleniec, M. Wiatr, M. Szaleniec, R. Przeklasa, J. Składzień, "Walidacja zewnętrzna modeli informatycznych prognozujących poprawę słuchu u po operacjach tympanoplastycznych", XLIV Zjazd Polskiego Towarzystwa Otolaryngologów Chirurgów Głowy i Szyi & IV Zjazd Polskiego Towarzystwa Chirurgów Podstawy Czaszki, Warszawa 2010
56. K. Szczepanowicz, L. Szyk-Warszyńska, D. Kędracki, E. Bielańska, P. Warszyński, "Formation of Biocompatible Nanocapsules with Emulsion Core and Pegylated Shell by Polyelectrolyte Multilayer Adsorption", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
57. K. Szczepanowicz, P. Warszyński, "Enkapsulacja czynników aktywnych w rdzeniach emulsyjnych". Seminarium Klaster LifeScience, Kraków 2010
58. Z. Tabor, P. Warszyński, "Modelling of Multifunctional Anticorrosion Coatings", 2<sup>nd</sup> MUST Workshop 'Self-healing Coatings: Effectiveness and Implementation', Noordwijk 2010
59. J. Thomas, A. Klisińska-Kopacz, J. Sobczyk, Ł. Bratasz, T. Łojewski, "Characterisation of Fading Behaviour of Coloured Papers during Simulated Display in Anoxia", 9<sup>th</sup> Conf. 'Indoor Air Quality in Museums and Archives', Chalon-sur-Saône 2010
60. B. Trzewik, M. Gryl, T. Seidler, E. Broclawik, K. Stadnicka, "Wyniki rentgenowskiej analizy strukturalnej - koniec czy początek badań chemika organika ?", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
61. P. Weroński, "From Randomness to Order: Modeling of Deposition of Colloid Particles", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
62. D. Wilk, Ł. Bratasz, R. Kozłowski, "Damage of Roman Cement Mortars Due to Drying Shrinkage", Historic Mortar Conf., Prague 2010
63. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, "Methane Activation and Partial Oxidation by Heteropolyacids and Metalorganic Complexes", NEXT-GTL Consortium Meeting, Firenze 2010
64. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, "Oxidative Activity of Substituted Keggin Units. Mechanism of Methane Activation by Metalorganic Complexes", NEXT-GTL Consortium Meeting, Roma 2010
65. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, D. Rutkowska-Żbik, "Description of Molybdenum Oxides as Precursor of Oxocarbides", NEXT-GTL Consortium Meeting, Firenze 2010
66. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, D. Rutkowska-Żbik, "Molybdenum Oxocarbides: Description of Active Sites and Reaction Mechanism", NEXT-GTL Consortium Meeting, Roma 2010

67. D. Wodka, E. Bielańska, R. P. Socha, M. Elźbieciak, J. Gurgul, P. Nowak, P. Warszyński, I. Kumakiri, "Photocatalytic Activity of Titanium Dioxide Modified by Silver Nanoparticles", Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants", Kraków 2010
68. E. Zackiewicz, N. Spiridis, R.P. Socha, J. Korecki, "Bimetallic Au-Fe Clusters on TiO<sub>2</sub>(110)", COST D36 Working Group 3 Meeting, Sibiu 2010
69. J. Zawała, K. Małyśa, "Interrelation of Impact Velocity, Size of the Liquid Film Formed and Lifetime of the Bubble at Liquid/Gas Interface", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
70. J. Zawała, D. Terwagne, S. Dorbolo, N. Vandewalle, K. Małyśa, "On Mechanism of the Bubble and Droplet Bouncing from the Liquid/gas Interface", EUFOAM 2010 Conf. & COST D43 Symposium & COST P21 Working Group Meeting, Borovets 2010
71. M. Zimowska, H. Palkowa, E. Bielańska, L. Lityńska-Dobrzyńska, Z. Olejniczak, J. Madejova, E.M. Serwicka, "Nowe porowate hetero struktury ilaste (PCH) na osnowie laponitu", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010

## POSTERY

1. M. Adamczak, H.J. Hoel, J. Barbasz, P. Warszyński, "Nanocapsules of Polyelectrolytes Labelled with Quantum Dots", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
2. M. Adamczak, H.J. Hoel, J. Barbasz, P. Warszyński, "Complexes of Polyelectrolytes with Quantum Dots", 3<sup>rd</sup> Int. NanoBio Conf. NanoBio 2010, Zurich 2010
3. M. Adamczak, H.J. Hoel, J. Barbasz, P. Warszyński, "Encapsulation of Quantum Dots in Complexes of Polyelectrolytes", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
4. Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Nattich, J. Barbasz, "Structures of Fibrinogen Layers on Mica Determined by AFM, Streaming Potential and the Colloid Enhancement", Workshop of COST Action D43, Genova 2010
5. Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Nattich, M. Radziszewska, J. Barbasz, "Fibrinogen Layers on Mica Analyzed by AFM, Streaming Potential and Measurements Colloid Enhancement", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
6. Z. Adamczyk, M. Zaucha, M. Zembala, "Characterization of Colloid Particles Monolayers on Mica by the Streaming Potential Measurements", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
7. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Radziszewska, J. Barbasz, "Fibrinogen Adsorption on Mica Studied by AFM, Streaming Potential and Colloid Enhancement", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010

8. J. Adamski, A. Kiszka, J. Kochana, P. Nowak, A. Parczewski, "Zastosowanie planu Placketta-Burmana do zbadania efektów matrycy w elektrochemicznym oznaczaniu polifenoli w winach", VIII Polska Konferencja Chemii Analitycznej 'Analityka dla społeczeństwa XXI wieku', Kraków 2010
9. J. Adamski, A. Kiszka, J. Kochana, P. Nowak, A. Jarosz-Wilkołazka, "Prosty czujnik elektrochemiczny do oznaczania polifenoli w winach", VIII Polska Konferencja Chemii Analitycznej 'Analityka dla społeczeństwa XXI wieku', Kraków 2010
10. M.A. Arribas, A. Burkat-Dulak, A. Martinez, M. Derewiński, "Improved Sulfur Resistance of Pd Nanoparticles Inside the Mesovoids of Carbon-templated HZSM-5", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
11. M.A. Arribas, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński "The Effect of Confining Pd Nanoparticles Inside the Mesovoids of Carbon-templated HZSM-5 on Sulfur Resistance During n-Octane Hydroconversion", 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesostructured Materials Symp. IZC-IMMS 2010, Sorrento 2010
12. M.A. Arribas, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński, "The Effect of Confining Pd Nanoparticles inside the Mesovoids of Carbon-templated HZSM-5 on Sulfur Resistance During n-Octane Hydroconversion", i-CATS Workshop 'Innovation in Catalysis for Sustainable Production & Energy', Messina 2010
13. U. Bazylińska, R. Skrzela, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, K.A. Wilk, "Dye-loaded Polymeric Nanocapsules Obtained in the Layer-by-layer Approach: Properties and Characteristics", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
14. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka, "New Insights into Charge Flow Processes and their Impact on the Activation of Ethene and Ethyne by Cu(I) and Ag(I) Sites in MFI", 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesostructured Materials Symp. IZC-IMMS 2010, Sorrento 2010
15. A. Dobija, W. Łasocha, W. Nitek, "Badania strukturalne grupy związków kompleksowych typu  $CdX_2 \cdot 2(NH_2-ArY)$ ", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
16. A. Dobija, W. Nitek, D. Mucha, W. Łasocha, "Synteza i analiza fizykochemiczna nowych peroxomolibdenianów", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
17. A. Dobija, W. Nitek, D. Mucha, W. Łasocha, "X-Ray and Decomposition Studies of two New  $\gamma$ -Octamolybdates", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
18. D. Dronka-Góra, A. Pajor, E. Jarek, G. Para, P. Warszyński, "Surface Tension and Surface Potential of DDTABr-PSS Mixtures", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
19. D. Dronka-Góra, A. Pajor, E. Jarek, G. Para, P. Warszyński, " Surface Properties of Cationic Surfactant Anionic Polyelectrolyte Mixtures", 12<sup>th</sup> Ukrainian-Polish Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and their Technological Applications, Ameliówka 2010

20. D. Dronka-Góra, G. Para, A. Hamerska, K. Wilk, P. Warszyński, "Formation of the Ionic Surfactant - Polyelectrolyte Surface Complexes as the Initial Stage of Nanostructure Building", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
21. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Mroczkowska, P. Dudek, "Co-Doped Ceria Electrolytes in the CeO<sub>2</sub>-M<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SrO, M=Sm, Gd System", 9<sup>th</sup> Int. Symp. on Systems with Fast Ionic Transport, Riga 2010
22. A. Dudzik, M. Szaleniec, A. Salwiński, M. Witko, J. Heider, "Ethylbenzene Dehydrogenase – Stereospecificity and Reaction Mechanism", 17<sup>th</sup> Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Poznań 2010
23. A. Dudzik, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "(S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase – Stereospecific Reduction of Ketones to Alcohols", 17<sup>th</sup> Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Poznań 2010
24. A. Dudzik, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "(S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase – Stereospecific Reduction of Ketones to Alcohols", Sesja Sprawozdawcza Projektu PO IG BIOTRANSFORMACJE, Szklarska Poręba 2010
25. A. Dudzik, M. Szaleniec, A. Salwiński, M. Witko, J. Heider, "Ethylbenzene Dehydrogenase – Stereospecificity and Reaction Mechanism", Sesja Sprawozdawcza Projektu PO IG BIOTRANSFORMACJE, Szklarska Poręba 2010
26. R. Dula, A. Michalik-Zym, T. Machej, W. Rojek, E.M. Serwicka, "Katalizatory tlenkowe zawierające mangan do całkowitego spalania metanu", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
27. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, E.M. Serwicka, L. Lityńska-Dobrzyńska, "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów rutenowych na nośnikach polimerowych do procesów uwodorniania", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
28. J. Dziedzic, D. Kędracki, P. Nowak, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, "Encapsulation of Oxidant Compounds in Application for Removal of Organic Contaminants from Water", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
29. J. Dziedzic, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, J. Kumakiri, C. Simon, "Photocatalytic degradation of the humic species as a method of their removal from water", 4<sup>th</sup> IDECAT Conf. on Catalysis 'Emerging Challenges in Catalysis', Porquerolles 2010
30. M. Elźbieciak, S. Zapotoczny, D. Wodka, P. Nowak, M. Nowakowska, P. Warszyński, "Effect of the Laponite Nanoparticles on the Thickness and Barrier Properties of the Model Polyelectrolyte Multilayer Films", IV<sup>th</sup> Int. Conf. on Molecular Materials MOLMAT, Montpellier 2010



31. M. Elżbieciak-Wodka, M. Kolasieńska, P. Nowak, P. Warszyński, "Effect of the Ionic Strength and First Anchoring Layer on the Thickness and Permeability of the PAH/PSS Multilayer Films", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
32. B. Figarska, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, B. Strzelczyk, K. Matlak, J. Korecki, "Ultrathin FeO and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> Oxides on Pt(111)", European Conf. on Surface Science ECOSS 27, Groningen 2010
33. U. Filek, A. Bressel, J. Frey, B. Sulikowski, D. Freude, M. Hunger, "Struktura soli AIPW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> i jej aktywność w eteryfikacji 1-fenyletanolu alkoholami C1- C4", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
34. K. Freindl, M. Zając, T. Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, K. Matlak, E. Zackiewicz, E. Partyka-Jankowska, J. Korecki, "Comparison of Oxygen Adsorption on Fe(110) Surface and Fe(110)/W(110) Monolayer", European Conf. on Surface Science ECOSS 27, Groningen 2010
35. T. Giela, K. Freindl, N. Spiridis, J. Korecki, "Au Films on W(110): Reconstruction and Dislocations", VI Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2010', Zakopane 2010
36. M. Góral, P.J. Kulesza, M. Jouini, C. Perruchot, I. Rutkowska, K. Miecznikowski, "Fast Charge Propagation at Poly(3, 4-ethylenedioxy-thiophene) and Poly(2, 2'-bithiophene) Hybrid Films Containing Mixed Addenda Dawson Heteropolyanion", 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
37. M. Grzesiak, A. Rafalska-Łasocha, W. Nitek, W. Łasocha, "Synteza i rezultaty badań dyfrakcyjnych nowych związków baru z wybranymi kwasami dikarboksylowymi", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
38. B. Jachimska, M. Nosek, P. Kobuz, K. Pamin, J. Połtowicz, R. Grabowski, "Incorporation of Macrocyclic Metallocomplexes into Liposomes: Physicochemical and Catalytic Characterization", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
39. B. Jachimska, A. Pajor, "Physico-chemical Characterization of Lysozyme (Conformational Stability, Shape and Effective Charge) and Deposition at Mica Surfaces", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
40. B. Jachimska, S. Zapotoczny, "Dendrimers- Reference System for the Studies of Proteins Adsorption", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
41. J. Janas, M. Che, S. Dźwigaj, "Design of Fe- and Co-Single Site Zeolites for the Selective Catalytic Reduction of NO by Ethanol", 2<sup>nd</sup> Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Krakow 2010

42. E. Jarek, D. Dronka-Góra, G. Para, P. Warszyński, " Surface Activity of Cationic Surfactant - Anionic Polyelectrolyte Complexes", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
43. A. Kalicińska, J. Stefańska, K. Szczepanowicz, S. Tyski, "The Biocidal Activity of Silver Nanoparticles Toward *Pseudomonas aeruginosa* Plankton and Biofilm", 20<sup>th</sup> European Congr. of Clinical Microbiology and Infectious Diseases, Vienna 2010
44. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, "Oxidation of Cyclohexene with Iodosobenzene Diacetate in the Presence of Transition Metal Substituted Polyoxometalates", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
45. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, "Oxidation of Cyclohexene with Iodosobenzene Diacetate in the Presence of Transition Metal Substituted Polyoxometalates", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
46. D. Kędracki, J. Dziejic, K. Szczepanowicz, P. Nowak, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, "Encapsulation of Oxidant Compounds in Application for Purification of Water", Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010
47. M. Kolasieńska, T. Gutberlet, H. Möhwald, R. Krastev, P. Warszyński, " Ordering of Nanoparticles in Polyelectrolyte Multilayers", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
48. M. Kolasieńska, T. Kruk, K. Szczepanowicz, P. Nowak, P. Warszyński, "Structure and Electrochemical Characterization of Silver Nanoparticles Embedded in Polyelectrolyte Multilayers", IV<sup>th</sup> Int. Conf. on Molecular Materials MOLMAT, Montpellier 2010
49. D. Kosior, J. Zawała, M. Krasowska, K. Małysa, "Air at Hydrophobic Surfaces and the Three-Phase Contact Formation", EUFOAM 2010 Conf., & COST D43 Symposium & COST P21 Working Group Meeting, Borovets 2010
50. T. Kruk, R. Socha, P. Nowak, E. Bielańska, K. Szczepanowicz, M. Kolasieńska, P. Warszyński, "Preparation and Characterization of Polyelectrolyte Multilayers Containing Silver Nanoparticles", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
51. P. Kozub, B. Jachimska, J. Połtowicz, A. Ratusza, "Physicochemical Characterization of Metallocomplexes Encapsulated into Liposomes", Zjazd PTChem i SITPChem, Gliwice 2010
52. M. Krzak, E. Bielańska, P. Nowak, P. Warszyński, "Modification of Epoxy Anticorrosive Coatings with Layered Silicates", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
53. M. Krzak, G. Mordarski, E. Bielańska, P. Nowak, G. Nawrat, Rhenium and its Alloys as Potential Electrocatalysts in Fuel Cells and in Water Electrolysis", 4<sup>th</sup> IDECAT Conf. on Catalysis 'Emerging Challenges in Catalysis', Porquerolles 2010

54. M. Krzak, G. Mordarski, P. Nowak, V. Pashova, L. Mirkova, M. Monev, "Rhenium Alloys as the Replacements of the Precious Metals in Fuel Cells and in Water Electrolysis", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
55. J. Kulbacka, J. Saczko, N. Skołuca, M. Majkowski, A. Choromańska, A. Chwilkowska, I. Kamińska, M. Kotulska, B. Jachimska, "Transport via Cell Membrane of the Novel Porphyrins Enhanced by Electroporation in vitro as Anticancer Therapy", 35<sup>th</sup> Federation of European Biochem. Soc. Congr., Gothenburg 2010
56. I. Kumakiri, C. Simon, K. Szczepanowicz, D. Wodka, P. Nowak, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, "Removal of Natural Organic Matters in Potable Water using Photocatalytic Membrane Reactor", Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow 2010
57. Ł. Lasyk, M. Łukomski, Ł. Bratasz, "Digital Speckle Pattern Interferometry (DSPI) for Condition Survey of Panel Paintings in the National Museum in Krakow, Poland", Workshop COST Action IE0601 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo 2010
58. A. Lewkowicz, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "Mechanism of Estrification on Heteropolyacid Catalyst. Theoretical DFT Studies", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
59. A. Lewkowicz, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, "Struktura elektronowa modelowych układów heteropolikwasów. Badania metodami periodycznymi", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
60. B. Lis, K. Adamowicz, M. Dudek, M. Mosiałek, G. Mordarski, A. Rapacz-Kmita, M. Krzak, „Nanokrystaliczne materiały w układzie  $\text{Ag/Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_2$ ,  $0.1 < x < 0.3$ , dla ogniw paliwowych IT-SOFC". XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
61. K. Luberda-Durnaś, M. Łoś, B. Gaweł, W. Łasocha, "Synthesis and Characterisation of New Inorganic-organic Composite  $\text{ZnS}(1,3\text{-DAP})_{1/2}$ ", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
62. K. Łątka, J. Gurgul, A.W. Pacyna, R. Pöttgen, "Electronic and Magnetic Properties of Ternary Stannides  $\text{RERhSn}$  ( $\text{RE} = \text{Tb}, \text{Dy}$  and  $\text{Ho}$ )", 17<sup>th</sup> Int. Conf. on Solid Compounds of Transition Elements, Annecy 2010
63. M. Łukomski, S. Jakiela, M. Strojceki, A. Haugen, T. Olstad, "Acoustic Emission for Assessing Risk of Climate-induced Damage: Monitoring the Altarpiece in the Church in Hedalen, Norway" Workshop COST Action IE0601 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo 2010
64. T. Machej, L. Matachowski, D. Mucha, J. Kryściak-Czerwenka, "Sorpcja tlenków azotu na solach  $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$  i  $\text{Ag}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$  – wpływ atomu addenda (W, Mo)", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
65. B. Martins, D. Snihrov, K. Szczepanowicz, P. Warszyński M.F. Montemor, "Self-healing Ability of Polyelectrolyte Nanocapsules with Emulsion Core Containing Corrosion Inhibitor for Protection of AA2024 Alloys", Conf. EIS 2010, Algarve 2010

66. A. Michna, Z. Adamczyk, E. Bielańska, M. Oćwieja, "Silver Nanoparticle Monolayers on Poly(ethylene imine) Covered Mica Produced by Colloidal Self-assembly", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
67. Ł. Mokrzycki, T. Machej, M. Zimowska, E.M. Serwicka, "Total Oxidation of Nitrogen Containing Compounds to Harmless Products over Mixed Oxides Catalysts", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
68. L. Matachowski, J. Gurgul, D. Mucha, M. Zimowska, R.P. Socha, "Redukcja soli  $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Ag}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ ,  $\text{Ag}_4\text{SiW}_{12}\text{O}_{40}$  i  $\text{Ag}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}$  w wodorze", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
69. J. Mizera, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, R. Socha, R. Grabowski, "Wpływ stopnia utlenienia niklu w układach Au-Ni-O/TiO<sub>2</sub> na ich aktywność katalityczną w reakcji utleniania CO", niklu w układach Au-Ni-O/TiO<sub>2</sub> na ich aktywność katalityczną w reakcji utleniania CO", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
70. E. Młyńczak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Giela, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Szczepanik, J. Korecki, "Ultrathin MgO Films on Fe(001): Growth, Morphology and Implementation in Magnetic Tunnel Junctions", Joint European Magnetic Symposia JEMS 2010, Kraków 2010
71. E. Młyńczak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Giela, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Szczepanik, J. Korecki, "Ultrathin MgO Films on Fe(001): Growth, Morphology and Implementation in Magnetic Tunnel Junctions", VI Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2010', Zakopane 2010
72. Ł. Mokrzycki, T. Machej, M. Zimowska, E.M. Serwicka, "Total Oxidation of Nitrogen Containing Compounds to Harmless Products over Mixed Oxide Catalysts", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
73. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski, "Podejścia typu "top-down" oraz "bottom-up" jako metody generowania wtórnego systemu porów i poprawy właściwości katalitycznych materiałów opartych na zeolicie typu ZSM-5", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
74. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński, "Colloid Silica Binders Wetting Property Modification in Investment Casting", 7<sup>th</sup> Int. Congr. 'Machines, Technologies, Materials', Sofia 2010
75. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński, "Improvements of Wetting Properties of Colloid Silica", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
76. M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, "Otrzymywanie i charakterystyka właściwości materiałów katodowych zawierających srebro- $\text{Ag}/\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$  i  $\text{Ag}/\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ ", Konf. Polska Ceramika 2010, Kraków 2010

77. B. Napruszewska, R. Dula, E. M. Serwicka, P. Michorczyk, "Układy tlenkowe pochodzenia hydrotalkitowego jako katalizatory odwodornienia propanu w obecności CO<sub>2</sub>", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
78. B. Napruszewska, R. Dula, E. M. Serwicka, "Ewolucja termiczna układów typu hydrotalkitu Zn-Mg-Ga-Al", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
79. M. Nosek, P. Weroński, J. Barbasz, P. Nowak, G. Mordarski, "Voltammetric Characterisation of Colloidal Particle Monolayer", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
80. P. Nowak, J. Adamski, J. Kochana, "Simple Sensor with Amperometric Detection Based on Tyrosinase for the Determination of Phenolic Compounds in Water", 217<sup>th</sup> Meeting of The Electrochemical Society, Vancouver 2010
81. J. Nowicki, B. Sulikowski, M. Muszyński, "Synthesis of New Perfluorinated Surfactants over Different Catalysts Using Fisher Glucosidation", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
82. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, A. Michna, E. Bielańska, "Self-assembled Silver Nanoparticle Layers of Controlled Density", Book of Abstracts. 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
83. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials Prepared by Assembling Nanosized Zeolite Seeds", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
84. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials Prepared by Assembling Nanosized Zeolite Seeds", i-CATS Workshop 'Innovation in Catalysis for Sustainable Production & Energy', Messina 2010
85. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchical Porous Materials bBased on the Colloidal Molecular Sieves", 4<sup>th</sup> IDECAT Conf. on Catalysis 'Emerging Challenges in Catalysis', Porquerolles 2010
86. K. Onik, E. Włoch, M. Derewiński, "Hierarchiczne materiały porowate oparte na koloidalnych sitach molekularnych", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
87. Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik, L. Fiedor, G. Stochel, " Structural and Electronic Effects on the Reactions of Metallochlorophyll Formation", 5<sup>th</sup> European Conf. 'Chemistry towards Biology', Primosten 2010
88. M. Oszejca, W. Łasocha, "Badania strukturalne nowych faz polimolibdenianowych", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
89. M. Oszejca, W. Nitek, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, "Badania strukturalne połączeń DMAN i kwasów di-karboksylowych", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010

90. M. Nosek, K. Pamin, B. Jachimska, J. Połtowicz, R. Grabowski, "Metallocomplexes Incorporated into Liposomes as Catalysts of Hydrocarbons Oxidation", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
91. A. Pacuła, M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Dudek, R.P. Socha, A. Rapacz-Kmita, "Ceramic Electrolytes in the CeO<sub>2</sub>-BaO-Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> System", 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
92. A. Pacuła, M. Mosiałek, R. Socha, M. Ruggiero, M. Zimowska, P. Nowak, "Electrode Materials Containing Cobalt Species and Nitrogen-doped Carbon Nanotubes", 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
93. A. Pacuła, K. Uosaki, K. Ikeda, "Synthesis and Characterization of Electroactive Composites Containing Cobalt Species and Nitrogen-doped Nanostructured Carbon", 61<sup>th</sup> Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, Nice 2010
94. A. Pajor, W. Barzyk, P. Warszyński, "Effect of Electrolytes on Surface Tension and Surface Potential of Solutions of C<sub>n</sub>TABr Cationic Surfactants", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
95. A. Pajor, B. Jachimska, "Functional Consequence of BSA Heterogeneity", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
96. K. Pamin, J. Połtowicz, G. Pozzi, J. Haber, "Wpływ podstawników perfluorowych na właściwości katalityczne i fizykochemiczne kompleksów salenowych", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
97. V.P. Pashova, L.G. Mirkova, M.H. Monev, P. Nowak, "Ni/Re-Co as Electrocatalytic Material for Hydrogen Evolution Reaction in Alkaline Water Electrocatalysis", Sofia Electrochemical Days, Sofia 2010
98. E. Peris, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński, "The Role of Mesovoids in Carbon-Templated MFI Crystals During Methane Dehydroaromatization (MDA) on Mo/HZSM-5 Catalyst", 16<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. & 7<sup>th</sup> Int. Mesoporous Materials Symp. IZC-IMMS 2010, Sorrento 2010
99. E. Peris, A. Martinez, A. Burkat-Dulak, M. Derewiński, "The Role of Mesovoids in Carbon-templated MFI Crystals During Methane Dehydroaromatization (MDA) on Mo/HZSM-5 Catalyst", i-CATS Workshop 'Innovation in Catalysis for Sustainable Production & Energy', Messina 2010
100. J. Plona, D. Mucha, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E. M. Serwicka, "Wpływ domieszki i warunków syntezy na właściwości fizykochemiczne katalizatorów Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> otrzymanych z prekursorów hydrotalcitowych", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
101. J. Plona, D. Mucha, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E.M. Serwicka, "Effect of Doping and Synthesis Conditions on the Physicochemical Properties of Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts Obtained from Hydrotalcite-like Precursors", 9th Natural Gas Conversion Symp. NGCS 9, Lyon 2010

102. J. Plona, D. Mucha, M. Śliwa, B. Napruszewska, M. Zimowska, R. Dula, E.M. Serwicka, "Effect of Doping and Synthesis Conditions on the Physicochemical Properties of Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts Obtained from Hydrotalcite-like Precursors", ISHC-17 Post Symposium 'Metal Nanoparticles in Catalysis', Wrocław 2010
103. J. Plona, D. Mucha, M. Zimowska, M. Śliwa, R. Grabowski, E.M. Serwicka "Optymalizacja katalizatora do syntezy metanolu z CO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
104. A. Płazińska, M. Koliński, W. Płaziński, I.W. Wainer, K. Józwiak, "Molecular Docking Study of Stereoisomers of Fenoterol Derivatives to the  $\beta$ 2-Adrenergic Receptor and Molecular Dynamics Simulations for the Selected Agonist- $\beta$ 2-AR Complexes", III Konwersatorium Chemii Medycznej, Lublin 2010
105. J. Połtowicz, M. Warcholik, R. Karcz, K. Pamin, R. Grabowski, J. Haber, "Porównanie właściwości katalitycznych kationowych kompleksów salenowych i porfirynowych w reakcji utleniania fenolu", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
106. R. Rachwalik, B. Sulikowski, M. Hunger, "Transformations of Monoterpene Hydrocarbons on Ferrierite Type Zeolites", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
107. P. Rejmak, M. Mitoraj, E. Broclawik, "QM/MM Studies on Ethene Adsorption on Cu(I) Exchanged zeolites", Summer School on Computational Materials Science, Donostia-San Sebastian 2010
108. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "Non-innocent" NO Ligand: Electronic States and NO Binding Energies in Selected {FeNO}<sup>7</sup> Complexes", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
109. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "DFT and Ab initio Modeling of Bioinorganic Iron Complexes with Non-innocent Ligands", Conf. 'Modeling and Design of Molecular Materials', Wrocław 2010
110. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "Iron Complexes with Noninnocent Ligands: Insight from DFT and Ab initio Calculations", Gordon Research Conf.: Computational Chemistry, Les Diablerets 2010
111. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot, "High Valent Iron-Oxo Complexes with Organic Macrocycles: DFT and Ab initio Study", 9<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry (CESTC 2010), Novy Smokovec 2010
112. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, Z. Kaszowska, T. Wróblewski, D. Zając, A. Rothkirch, W. Łasocha, "Synchrotron X-Ray Powder Microdiffraction and Microfluorescence for Identifications of Green Pigments in the Gothic Altar Paintings from Malopolska Region", 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków 2010
113. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, Z. Kaszowska, T. Wróblewski, D. Zając, A. Rothkirch, W. Łasocha, "Badania pigmentów z zabytkowych obrazów z wykorzystaniem metody dyfrakcyjnej i mikrodyfrakcyjnej", Giełda Prac Dyplomowych, Kraków 2010

114. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, Z. Kaszowska, T. Wróblewski, D. Zając, A. Rothkirch, W. Łasocha, "Identyfikacja zielonych pigmentów zabytkowych gotyckich obiektów techniką dyfrakcji i mikrofluorescencji rentgenowskiej z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
115. A. Rafalska-Łasocha, J. Holc, E. Bielańska, W. Łasocha, "Badania produktów korozji metalowych nici z arrasów wawelskich z wykorzystaniem technik XRD i SEM/EDX", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
116. A. Rafalska-Łasocha, J. Holc, E. Bielańska, W. Łasocha, "XRD and SEM/EDX Investigations of the Corrosion Products of the Metal Threads from the Tapestry of Sigimund Augustus", 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków 2010
117. A. Rafalska-Łasocha, K. Podulka, R. Dziembaj, W. Łasocha, "XRD Investigations of Commercially Available Prussian Blue Pigments and Oil Paints", 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków 2010
118. A. Rafalska-Łasocha, K. Podulka, R. Dziembaj, W. Łasocha, "Badania syntetycznego pigmentu błękit pruski z wykorzystaniem metody XRD", 52 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2010
119. D. Rutkowska-Żbik, Ł. Orzeł, A. Kania, A. Susz, L. Fiedor, M. Witko, G. Stochel, "Theoretical Investigation of Structural and Electronic Effects in the Metalation of Tetrapyrroles", Conf. Modeling & Design of Molecular Materials 2010, Wrocław 2010
120. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, A. Lewkowicz, R. Gryboś, M. Witko, "Preliminary DFT Calculations on Pt and Pd N-Heterocyclic Carbene Complexes for Methane Activation", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
121. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, A. Lewkowicz, R. Gryboś, M. Witko, "DFT Calculations on Noble Metal N-Heterocyclic Carbene Complexes for Methane Activation", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
122. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, P. Hejduk, K. Alexopoulos, M.-F. Reyniers, G.B. Marin, P. Sautet, ""Metal Oxides for Catalysis", Conf, i-CATs Innovation in Catalysis for Sustainable Production & Energy. Towards a Roadmap for Catalysis, Messina 2010
123. R. Skrzela, G. Para, P. Warszyński, K.A. Wilk, "Adsorption of Novel Dicarboxylic Ammonium Surfactants and Polyelectrolytes at the Air/water Interface", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
124. M. Szaleniec, T. Borowski, K. Schühle, M. Witko, J. Heider, "Ab initio Modeling of Ethylbenzene Dehydrogenase Reaction Mechanism", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010



125. M. Szaleniec, T. Borowski, K. Schühle, M. Witko, J. Heider, "Ab initio Modeling of Ethylbenzene Dehydrogenase Reaction Mechanism", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
126. M. Szaleniec, A. Dudzik, M. Witko, J. Heider, "(S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase - Stereospecific Reduction of Ketones to Alcohols", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
127. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A. M. Buzga, C. Simon, P. Warszyński, "Silica Sources Hydrolysis as a Mechanism of Microencapsules Formation", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
128. K. Szczepanowicz, H.J. Hoel, L. Szyk-Warszyńska, E. Bielańska, A. Bouzga, G. Gaudernack, C. Simon, P. Warszyński, "Preparation of Polyelectrolyte Nanocapsules with Emulsion Cores and their Functionalization by Pegylation and Immobilization of Antibody" 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
129. K. Szczepanowicz, H.J. Hoel, G. Gaudernack, P. Warszyński, "Formation of Nanocapsules with Emulsion Core and Pegylated Shell by Polyelectrolyte Multilayer Adsorption", XVIII Int. Conf. on Bioencapsulation, Porto 2010
130. K. Szczepanowicz, G. Para, A. Hamerska-Dudra, K. Wilk, P. Warszyński, "The Interfacial Properties of Cationic Surfactants/polyanion Systems", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
131. K. Szczepanowicz, G. Para, A. Hamerska-Dudra, K.A. Wilk, P. Warszyński, "Encapsulation of Surfactant-polyelectrolyte Complexes via Sequential Adsorption of Polyelectrolytes", 24<sup>th</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society ECIS2010, Prague 2010
132. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, P. Warszyński "Thickness and Stability of PLL-casein Multilayers", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
133. L. SzykWarszyńska, J. Piekoszewska, R.P. Socha, P. Warszyński "Formation, Stability of PLL/casein Multilayer Films and their Ability to Bind Divalent Cations", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
134. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, R.P. Socha, P. Warszyński "Polyelectrolyte-casein Films, Formation, Stability and Complexation of Divalent Cations", 6<sup>th</sup> Int. Conf. on Interfaces against Pollution IAP 2010, Beijing 2010
135. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński, "Formation of Polyelectrolyte Multilayer Films at Heterogeneous Surfaces". US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
136. M. Śliwa, R. Grabowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, "Influence of Metallic Component Modification of Bifunctional Catalysts on its Activity in Direct Synthesis of Dimethyl Ether from Syngas", 9<sup>th</sup> Novel Gas Conversion Symp., Lyon 2010

137. M. Śliwa, R. Grabowski, M. Zimowska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, "Wpływ modyfikacji składowej metalicznej katalizatora bifunkcyjnego na jego właściwości fizykochemiczne oraz aktywność w procesie jednoetapowej syntezy eteru dimetylowego z gazu syntezowego", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
138. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, A. Lewkowicz, M. Witko, "Electronic Structure of the Active Centers in Molybdenum Heteropolyacid and Oxide. Cluster DFT Studies", 13<sup>th</sup> Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis (ICTAC-13), Matsushima 2010
139. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, A. Lewkowicz, M. Witko, "Wpływ otoczenia na strukturę elektronową centrów aktywnych w heteropolikwasach i tlenku molibdenu(VI)", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
140. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, "Deposition of Core-polyelectrolyte Stell Structures at Heterogeneous Surfaces Modified by Polyelectrolyte Multilayers", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
141. T. Urbańczyk, M. Strojceki, J. Koperski, "Investigation of the  $E^3\Sigma^+(6^3S_1)$  Rydberg Electronic Energy State in CdRG (RG=Ar,Kr) Complexes Using Optical-optical Double Resonance", 21<sup>st</sup> Int. Conf. 'High Resolution Molecular Spectroscopy', Poznań 2010
142. T. Urbanczyk, M. Strojceki, J. Koperski, "Structure of Vibrational Bands of the  $E^3\Sigma^+(6^3S_1) \leftarrow A^3\Pi(5^3P_1)$  Electronic Transition in CdRG (RG=Ar,Kr)", 10<sup>th</sup> European Conf. 'Atoms Molecules and Photons', Salamanca 2010
143. P. Warszyński, P. Dyshlovenko, P. Dejardin, "Electrostatic Interactions between Spherical Particle with Dipolar Charge Distribution and Charged Surface", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
144. T.P. Warzocha, T. Pańczyk, "Influence of Various Magnetic Nanoparticles on Behaviour of Magnetically Controlled Nanocapsule", Conf. MolSim2010, Amsterdam 2010
145. T.P. Warzocha, T. Pańczyk, W. Rudziński, "Influence of the Structure of a 'Nanocapsule' on its Properties and Behaviour under External Magnetic Field: Monte Carlo Study", 12<sup>th</sup> Ukrainian-Polish Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and their Technological Applications, Ameliówka 2010
146. A. Węgrzynowicz, M. Derewiński, "Eliminacja defektów/pęknięć w wysokokrzemowych membranach zeolitowych typu MFI", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
147. D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, K. Matlak, B. Figarska, B. Strzelczyk, J. Korecki, "Ultracienkie warstwy FeO oraz Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> na powierzchni Pt(111)", VI Sem. 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2010', Zakopane 2010
148. D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki, "Nanoscale Spectro-microscopy for Krakow Synchrotron", " , 10<sup>th</sup> Int. Symp. & School on Synchrotron Radiation in Natural Science (ISSRNS-10), Szklarska Poręba 2010

149. D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński, I. Kumakiri, "Photocatalytic Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment – Preparation and Testing of the Photo-Catalyst", US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces', Krakow 2010
150. A. Wójcik, T. Borowski, E. Broclawik, "The Mechanism of the Reaction of Intradiol Dioxygenase with Hydroperoxy Probe. A DFT Study", Conf. 'Modeling and Design of Molecular Materials', Wroclaw 2010
151. E. Zackiewicz, R.P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki, "Rola prekursora w osadzaniu bimetalicznego katalizatora modelowego Au-Fe na  $\text{TiO}_2(110)$ ", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
152. E. Zackiewicz, R.P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki, "STM and XPS Studies of bi-Metallic Au-Fe Clusters on  $\text{TiO}_2(110)$ ", European Conf. on Surface Science ECOSS 27, Groningen 2010
153. D.A. Zając, A. Rothkirch, K. Pająk, M. Grzesiak, J. Śliwińska, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, "XFS Investigation of Byzantine XVI Century Wall Paintings", HASYLAB Users' Meeting, Hamburg 2010
154. J. Zawała, K. Małysa, "Influence of the Liquid Film Dimensions on the Bubble Bouncing from Various Interfaces", 14<sup>th</sup> Int. Conf. 'Surface Forces', Moscow-St. Petersburg 2010
155. A. Zięba, L. Matachowski, E. Bielańska, A. Drelinkiewicz, "Transesterification of Castor Oil and Triacetin with Methanol Catalysed by Ag-Salts of 12-Tungstophosphoric acid", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
156. A. Zięba, L. Matachowski, A. Drelinkiewicz, "Sole  $\text{Cs}_x\text{H}_{3-x}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$  jako katalizatory kwasowe w reakcjach odwodnienia etanolu i transestryfikacji triglicerydów metanolem", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
157. A. Zięba, L. Matachowski, E. Lalik, A. Drelinkiewicz, "Solid Potassium and Cesium Salts of 12-Tungstophosphoric Acid as Catalysts for Bio-esters (Biodiesel) Formation", 10<sup>th</sup> Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Krakow 2010
158. A. Zięba, A. Pacuła, A. Drelinkiewicz, "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności  $\text{Zn}_5(\text{OH})_8(\text{NO}_3)_2 \times 2 \text{H}_2\text{O}$ ", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
159. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, R. Dula, E.M. Serwicka, "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów rutenowych na nośnikach tlenkowych do procesów uwodornienia", XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2010
160. M. Zimowska, B.D. Napruszewska, R. Dula, D. Mucha, E.M. Serwicka, "Kinetics of Zn-Al Hydrotalcite Structure Reconstruction Process", 5<sup>th</sup> Mid-European Clay Conf. MECC2010, Budapest 2010

## WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. T. Borowski, "On the Mechanism of O-O Bond Cleavage in Extradiol Dioxygenases", Stockholm University, Stockholm 2010
2. A. Drelinkiewicz, R. Kosydar, "Hydrogenation of Amylanthraquinone in the Presence of Palladium Catalysts", Solvay Research & Technology, Brussels 2010
3. R. Gryboś, "DeNOx Catalysts. Between Theory and Industry", Pracownia Chemii Kwantowej, Uniwersytet Warszawski, 2010
4. M. Łukomski, "Badanie mikrouszkodzeń powierzchni polichromowanych w celu opracowania najlepszej strategii ochrony dzieł sztuki", Instytut Fizyki UJ, Kraków 2010
5. M. Łukomski, "Badanie mikrouszkodzeń powierzchni polichromowanych w celu opracowania najlepszej strategii ochrony dzieł sztuki", Polskie Towarzystwo Chemiczne, Oddział w Krakowie 2010
6. A. Pacuła, K. Uosaki, "Synthesis and Characterization of the Physicochemical Properties of Porous N-Doped Carbon Materials Possessing Graphite-like Structure and Testing them as Supports for Transition Metals in Electrocatalysis", National Institute for Materials Science (NIMS) & International Center for Materials Nanoarchitectonics (MANA), Tsukuba 2010
7. D. Rutkowska-Żbik, "Kwantowo-chemiczne modelowanie procesów katalitycznych zachodzących z udziałem porfiryn manganu", Zakład Chemii Teoretycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2010

## WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. E. Bielańska, "Elektronowa mikroskopia skaningowa i transmisyjna", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKFP PAN (8 godz.)
2. T. Borowski, "Chemia kwantowa makrocząsteczek", ćwiczenia w pracowni komputerowej (30 godz.)
3. Ł. Bratasz, "Konserwacja, kształtowanie architektury i aranżacja wnętrz obiektów sakralnych", wykład dla słuchaczy studium podyplomowego Politechniki Krakowskiej (4 godz.)
4. Ł. Bratasz, "Nowoczesne techniki analityczne dla konserwacji obiektów zabytkowych", wykład dla słuchaczy studium podyplomowego Wydziału Chemii UJ (4 godz.)
5. E. Broclawik, koordynacja wykładu z chemii fizycznej dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN
6. E. Broclawik, "Struktura, spektroskopia i oddziaływania", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (14 godz.)

7. E. Broclawik, "Chemia Kwantowa Makrocząsteczek", wykład dla studentów biofizyki w Instytucie Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ (30 godz.)
8. E. Broclawik, "Stosowana Chemia Kwantowa", wykład dla doktorantów Środowiskowego Studium Doktoranckiego przy Wydziale Chemii UJ (30 godz.)
9. M. Derewiński, "Wstęp do spektroskopii w podczerwieni i Ramana", wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (8 godz.)
10. A. Drelinkiewicz, "Chemia fizyczna", wykład dla Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (20 godz.)
11. M. Góral, "Academic English", kurs dla doktorantów Wydziału Chemii, Uniwersytetu Warszawskiego (30 godz.)
12. R. Grabowski, "Adsorpcja na powierzchni ciał stałych", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (2 godz.)
13. J. Gurgul, "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (2 godz.)
14. J. Gurgul, "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis", wykład dla studentów i doktorantów w Akademii Górniczo-Hutniczej (2 godz.)
15. B. Jachimska, "Metoda dynamicznego rozpraszania światła (DLS) pomiary wielkości cząstek koloidalnych", wykłady dla studentów 4 roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (2godz.)
16. B. Jachimska, "Laser Doppler Velocimetry - Pomiary ruchliwości elektroforetycznej cząstek koloidalnych", wykłady dla studentów 4 roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (2 godz.)
17. J. Korecki, pensum dydaktyczne AGH (pełny etat)
18. J. Korecki, wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN
19. R. Kozłowski, "Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach", wykład i konsultacje w Instytucie Zabytkoznawstwa i Konserwatorstwa UMK w Toruniu (4 godz.)
20. W. Łasocha, "Dyfrakcja proszkowa i krystalografia w katalizie", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKFP PAN (4 godz.)
21. W. Łasocha, "Krystalografia i badania strukturalne, kamienie milowe i nowości", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKFP PAN (4 godz.)
22. P. Nowak, "Metody doświadczalne i obliczeniowe badań fizykochemicznych własności materiałów", wykład dla doktorantów ISD (4 godz.)

23. P. Nowak, "Wybrane zagadnienia i metody współczesnej fizykochemii", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKFP PAN (4 godz.)
24. W. Rudziński, "Chemia Teoretyczna", wykład w języku polskim i angielskim dla studentów Wydziału Chemii UMCS (60 godz.)
25. E.M. Serwicka, "Fizykochemiczne metody badania katalizatorów – EPR", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
26. B. Sulikowski, koordynator wykładów "Wybrane zagadnienia i metody współczesnej fizykochemii", Międzynarodowe Studium Doktoranckie IKiFP PAN (60 godz. wykładów, 11 wykładowców)
27. B. Sulikowski, "Spektroskopia Magnetycznego Rezonansu Jądrowego", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
28. M. Szaleniec, "Analiza tłuszczów i lipidów", wykład dla studiów podyplomowych Biologii Molekularnej z Elementami Biotechnologii, Uniwersytet Pedagogiczny w Krakowie (4 godz.)
29. M. Szaleniec, "Analiza tłuszczów i lipidów", ćwiczenia laboratoryjne dla studiów podyplomowych Biologii Molekularnej z Elementami Biotechnologii, Uniwersytet Pedagogiczny w Krakowie (20 godz.)
30. P. Warszzyński, "Chemia Fizyczna". wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (12 godz.)

## **SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU**

### **WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI**

1. M. Banach (Politechnika Krakowska), "Otrzymywanie tripolifosforanu sodu o kontrolowanej gęstości nasypowej"
2. P. Błoński (Universität Wien), "Badania z pierwszych zasad wczesnych etapów utleniania żelaza"
3. M.L. Ekiel-Jeżowska (Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN), "Dynamika cząstek porowatych w gęstych zawiesinach"
4. A. Garcia-Cruz (Université Lyon), "Synthesis of Gold-containing Core-shell Nanostructures for Catalytic CO Oxidation"
5. K. Kubiak-Ossowska (University of Strathclyde), "What Governs Protein Adsorption at a Acidic Surface ?"
6. D. Kuryłek (Muzeum Narodowe w Krakowie), "Tylko szczęśliwi, niewinni i bezduszni potrafili latać" - wykład bożonarodzeniowy

7. W. Marcinkowski (Muzeum Narodowe w Krakowie), "Sposoby przedstawiania Zmartwychwstania w sztuce średniowiecznej" - wykład wielkanocny
8. A. Sobczak (Politechnika Krakowska), "Właściwości fizykochemiczne i ocena aktywności biologicznej hydroksyapatytu pochodzenia naturalnego"
9. K. Uosaki (National Institute for Material Science, Tsukuba), "Construction, Structure and Functionalizations of Organic Monolayers on Metal and Semiconductors Surfaces"
10. I.E. Wachs (Lehigh University, Bethlehem), "Tuning the Selective Oxidation of CH<sub>3</sub>OH to (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CH<sub>2</sub> over Supported V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> Catalyst with TiO<sub>2</sub> Nanoligands"
11. I.E. Wachs (Lehigh University, Bethlehem), "Resolving the Contributions of Surface Lewis and Brønsted Acid Sites During the Selective Catalytic Reduction of NO<sub>x</sub> with NH<sub>3</sub> over Supported V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-WO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> Catalyst"

### WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. E. Broclawik, "Przepływ gęstości elektronowej a aktywność centrów Cu(I) w zeolitach: perspektywa ETS-NOCV"
2. M. Góral, T. McCormac, E. Dempsey, A. M. Bond, "Electrochemical Investigations into Heteropolyanions"
3. M. Krzan, "Stability of Bovine Serum Albumine Foams in Hele-Shaw Cell"
4. A. Niedzielska, "Polsko-szwajcarski mechanizm finansowy współpracy naukowej"
5. A. Niedzielska, "Projekt ISD MOL-MED. Nauki Molekularne dla Medycyny"
6. J. Plona, "Katalizatory do syntezy metanolu z CO<sub>2</sub> otrzymane z prekursorów o charakterze hydrotalkitu"

### WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. A. Bielański, "Jak nie święci garnki lepią ?"
2. Ł. Bratasz, "Globalne ocieplenie - zabytki w niebezpieczeństwie"
3. E. Jarek, "Od ziółka do mikrokapsułki - nowoczesnego nośnika leków i nie tylko ..."
4. E. Młyńczak, T. Giela, "Jak działają wyświetlacze - od kineskopu do e-papieru"
5. J. Szaleniec, M. Szaleniec, "Enzymy – biokatalizatory życia"

### WYKŁADY POPULARNO-NAUKOWE

1. A. Bielański, "Kilka kartek z historii chemii: prorocy i szczęściarze", Festiwal Nauki, Kraków 2010

2. A. Bielański, "Pierwiastki we Wszechświecie", Zjazd Absolwentów Chemii UJ, Kraków 2010
3. R. Kozłowski, "Problemy ogrzewania wielkokubatorowych obiektów zabytkowych", Konf. 'Obiekty zabytkowe i ich otoczenie: konserwacja, renowacja, zagospodarowanie terenu. Wybrane problemy z dziedziny konserwacji zabytków', Nysa 2010

## **NADANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE**

### **PROFESORA**

1. R. Kozłowski

### **DOKTORA HABILITOWANEGO**

1. A. Micek-Ilnicka, "Heteropolikwasy jako katalizatory syntezy eteru etylo-*tert*-butylowego ETBE – kinetyka i mechanizm reakcji"
2. R. Tokarz-Sobieraj, "Kwantowo-chemiczny opis centrów aktywnych w katalizatorach opartych na związkach molibdenu"

### **DOKTORA**

1. A. Knapik, "Synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne układów Pd-modyfikowane żywice metakrylanowe" (promotor A. Drelinkiewicz)
2. L. Matachowski, "Struktura a właściwości katalityczne soli potasowych i cezowych kwasu fosforowolframowego" (promotor A. Drelinkiewicz)
3. G. Mordarski, "Warunki i przyczyny powstawania różnicy potencjałów pomiędzy elektrodami w jednokomorowym ogniwie paliwowym opartym na stałym elektrolicie z mieszanych tlenków" (promotor P. Nowak)
4. K. Szczepanowicz, "Encapsulation of active agents in liquid core capsules" (promotor P. Warszzyński)
5. A. Zięba, "Badania nad transestryfikacją triglicerydów w procesie katalitycznego wytwarzania bioestrów (Biodiesla)" (promotor A. Drelinkiewicz)

## **KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE**

1. International Workshop 'Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood', Oslo, February 18<sup>th</sup>-19<sup>th</sup>, 2010 (R. Kozłowski, Ł. Bratasz)
2. MUST EC 7<sup>th</sup> FP Project Workshop, Krakow, March 10<sup>th</sup>, 2010 (P. Warszzyński)
3. XLII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 15-17 marca 2010 (B. Sulikowski).



4. Workshop on Photocatalysis and its Application in Removal of Contaminants, Krakow, March 17<sup>th</sup>-18<sup>th</sup>, 2010 (P. Nowak)
5. Seminarium Klaster Life Science, Kraków, 30 marca 2010 (E.Serwicka-Bahranowska)
6. International Workshop 'Modeling Mechanical Behaviour of Wooden Cultural Objects', Krakow, April 12<sup>th</sup>-13<sup>th</sup>, 2010 (Ł. Bratasz)
7. Warsztat 'Ochrona drewna polichromowanego: zarządzanie klimatem w budowlach zabytkowych i muzeach'; Warszawa, 20 kwietnia 2010, (R. Kozłowski)
8. 3<sup>rd</sup> Meeting 'X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage: Around Rembrandt and His Workshop', Kraków, May 13<sup>th</sup>-16<sup>th</sup>, 2010 (R. Kozłowski, W. Łasocha)
9. US-Poland Workshop & Summer School 'Nanoscale Phenomena in Materials and at Interfaces'; Krakow, June 6<sup>th</sup>-10<sup>th</sup>, 2010 (Z. Adamczyk)
10. 10<sup>th</sup> Pannonian International Symposium on Catalysis, Krakow, August 29<sup>th</sup>-September 2<sup>nd</sup>, 2010 (M. Derewiński)

#### **IMPREZY POPOLARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE**

1. Festiwal Nauki 'Technologia-Sztuka-Życie', Kraków, 12-15 maja 2010 (M. Barańska)
2. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 27 października 2010 (M. Derewiński, M. Witko)

