



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

**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2008**



Kraków, marzec 2009

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2008	9
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2008	15
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2008	21
Działalność statutowa Instytutu	21
Projekty badawcze własne	67
Projekty badawcze promotorskie	89
Projekty badawcze habilitacyjne	101
Projekty badawcze POL POST DOC	105
Projekty badawcze zamawiane	111
Krajowe sieci badawcze	119
Inicjatywa Technologiczna I	125
Projekty 6. Programu Ramowego UE	129
Projekty 7. Programu Ramowego UE	139
Projekty EU COST Action	145
Projekty EOG	153
Inne międzynarodowe projekty badawcze	157
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	165
Współpraca z innymi instytucjami i przemysłem w roku 2008	171
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2008	175
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	175
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	211
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	241

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 na świecie całkowicie poświęconych 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 109 pracowników, w tym 42 na stanowiskach naukowych. W badaniach uczestniczy też 20 doktorantów.

W roku 2008 (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 również 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 różnym aspektom opisu 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 sufraktantów 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 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 CezaS".

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, opracowywany plan zahamowania zniszczeń przez zastosowanie kontrolowania mikroklimatu wewnątrz grotty.

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 bieżącym uruchomiono projekt finansowany z Funduszy Strukturalnych UE MPD "Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures", mający na celu finansowanie badań naukowych doktorantów wyłonionych w drodze konkursów.

Współpraca krajowa

Instytut szczyci się wieloletnią tradycją w organizacji i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i chemii powierzchni w Polsce. Od czterdziestu lat Instytut organizuje cieszące się wielką popularnością w środowisku naukowym, coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne; w roku 2008 odbyło się 40. jubileuszowe kolokwium mające z tego powodu charakter międzynarodowy. 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).

Współpraca międzynarodowa

Instytut jest szeroko zaangażowany we współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w ponad 40 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 realizowany był we współpracy z University of Nottingham, Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, University of Stuttgart, Humboldt University, University of Lund. Projekt realizowany poprzez długoterminowe staże przyjazdowe i wyjazdowe naukowców partnerskich instytucji, a celem było opracowanie i synteza katalizatorów porowatych o właściwościach niezbędnych dla realizacji konkretnych reakcji katalitycznych.

Instytut zaangażowany jest także w prace dwóch innych europejskich sieci badawczych "IDECAT - Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production" i "ACENET - Applied Catalysis European Network". IDECAT jest projektem typu sieci doskonałości realizowanym od 2005 roku 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.

ACENET jest projektem typu ERA-NET 6. Programu Ramowego UE i jest realizowany od 2004 roku. W ramach projektu współpracują krajowe organizacje zarządzające nauką i/lub finansujące badania naukowe z 10 krajów (Holandia-koordynator, Francja, Niemcy, Grecja, Irlandia, Włochy, Polska, Portugalia, Hiszpania, i Wielka Brytania). Podstawowym celem projektu jest osiągnięcie spójności i koordynacja narodowych programów i polityki naukowej w zakresie katalizy stosowanej. Instytut odpowiada w programie za zadania związane z kształceniem w zakresie nauki o katalizie. W roku 2008 administrowanie projektem ACENETw Polsce przejęło, na mocy rozporządzeń UE i RP, Narodowe Centrum Badań i Rozwoju.

Instytut realizuje obecnie 16 projektów europejskich, w tym 2 projekty Europejskiego Obszaru Gospodarczego, 4 projekty UE COST Action i 3 projekty ERA-NET. Realizowane są także 4 projekty Sektorowych Programów Operacyjnych współfinansowanych przez Komisję Europejską. W roku 2008 uruchomiono realizację 3 projektów 7. Programu Ramowego a 1 znajduje się w fazie negocjacji kontraktu. Na ogłoszone konkursy 7. PR 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 2008

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych	
1.1. Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów i ich wykorzystanie jako prekursory w preparatyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdziału	25
1.2. Oddziaływanie wieloskładnikowych układów zawierających wodór i gaz szlachetny z powierzchnią katalizatorów metalicznych opartych na złocie lub palladzie badane za pomocą mikrokalorymetru przepływowego sprzężonego ze spektrometrem masowym	26
1.3. Właściwości fizykochemiczne i katalityczne układów Pt-polimery	27
1.4. Właściwości strukturalne i dynamika w epitaksjalnych nanostukturach metalicznych i tlenkowych badane z użyciem skaningowej mikroskopii tunelowej i promieniowania synchrotronowego	28
1.5. Materiały mezoporowate jako nanoreaktory katalityczne	29
1.6. Fotokatalityczne właściwości nanostrukturalnego ditlenku tytanu domieszkowanego metalami przejściowymi i związkami metali przejściowych	30
1.7. Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe; synteza i badania strukturalne	31
1.8. Zredukowana sól srebrowa heteropolikwasu typu Wellsa-Dawsona jako katalizator bifunkcyjny	32
1.9. Synteza nanostrukturalnych katalizatorów typu mieszanych tlenków o właściwościach zasadowych	33
2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju	
2.1. Proces transestryfikacji oleju rycynowego oraz synteza katalizatorów	37
2.2. Katalityczne utlenianie sadzy	38
2.3. Reakcja epoksydacji olefin tlenem molekularnym w obecności koreduktora - badanie właściwości katalitycznych heteropolizwiązków	39
2.4. Badanie procesu redukcji w układzie Cu-Mn-Zn-O	40
2.5. Katalityczne usuwanie związków allochtonicznych z zastosowaniem salenowych kompleksów metali przejściowych	41
2.6. Wybrane reakcje węglowodorów z grupy monoterpenu na materiałach mikro- i mezoporowatych	42
2.7. Stałe superkwasy oraz nowe perokso-związki Mo(VI), W(VI) i V(V), synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne	43
3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy	
3.1. Wpływ domieszki i nośnika na procesy adsorpcji małych cząsteczek na katalizatorach molibdenowych – badania kwantowo-chemiczne	47
3.2. Kwantowo-chemiczne badania nad mechanizmem utleniania allilowego cykloheksenu na porfirynie manganu(III)	48
3.3. Teoretyczne modelowanie procesu selektywnej redukcji tlenków azotu	49
3.4. Właściwości strukturalne i elektronowe metalicznych centrów aktywnych w materiałach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne	50
3.5. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne	51

3.6. Opis teoretyczny procesów sorpcji stosowanych w technologiach ochrony środowiska 52

4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów

4.1. Określenie właściwości fizykochemicznych białek globularnych w roztworach elektrolitów pod kątem ich aplikacji jako składników biosensorów 55

4.2. Wpływ energii kinetycznej na odbicia i czas życia pęcherzyka na swobodnej powierzchni 56

5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe

5.1. Wyznaczenie korelacji pomiędzy konformacją i kształtem cząsteczek polielektrolitów, a kinetyką i strukturą tworzonych monowarstw cząstek koloidalnych 59

5.2. Właściwości powierzchni międzyfazowych i emulsyfikacja w układach chloroform – TEOS i chloroform – APS w roztworach surfaktantów) 60

5.3. Elektroaktywne cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanostrukturami węglowymi 61

6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

6.1. Monitorowanie stanu powierzchni obiektów zabytkowych przy zastosowaniu metod optycznych 65

PROJEKTY BADAWCZE (GRANTY) KBN

Projekty badawcze własne

1. 3 T09A 092 29 [2005-2008] Wpływ położenia metalu przejściowego w strukturze heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną i na mechanizm reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych 69

2. 3 T09B 091 29 [2005-2008] Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych: metaloporfiryn, metalo-ftalocyanin i metalosalenów do katalitycznego utleniania propylenu 70

3. 3 T09A 029 29 [2005-2008] membrany na bazie zeolitów typu MFI, FAU i BEA jako nowe nanomateriały dla procesów rozdziału mieszanin węglowodorów 71

4. 1 T09A 094 30 [2006-2009] Badania efektywności aktywacji wodorowej naniesionych katalizatorów na osnowie cząstek złota 72

5. 1 T09A 123 30 [2006-2009] Mechanizmy tworzenia multiwarstw o kontrolowanej mikroarchitekturze na powierzchniach metalicznych 73

6. 1 T09A 122 30 [2006-2009] Wpływ kadmu i selenu na właściwości powierzchniowe modelowych warstw lipidowych preparowanych na bazie naturalnych błon komórkowych 74

7. N204 024 31/0475 [2006-2008] Teoretyczne badania heterogeniczności powierzchni katalizatorów na bazie tlenków wanadu 75

8. N204 166 31/3734 [2006-2009] Struktura, właściwości powierzchniowe i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polielektrolitów dla zastosowań w modyfikacji powierzchni i enkapsulacji substancji chemicznych 76

9. N204 164 31/3689 [2006-2009] Heteropolikwasy jako katalizatory w reakcji syntezy eteru tert-butyłowego (ETBE) w fazie gazowej 77

10. N204 034 31/0795 [2006-2008] Teoretyczny opis aktywacji tlenu i reaktywności różnych centrów tlenowych w hetero- i homogenicznych molibdenowych układach katalitycznych 78

11. N205 022 31/1112 [2006-2009] Nowa metoda wytwarzania nośników nano- oraz mikro kapsularnych o określonej funkcjonalności do selektywnego dostarczania reagentów	79
12. N204 089 32/2633 [2007-2010] Mechanizm działania katalizatorów "nano-Au/tlenek" w reakcjach utleniania CO	80
13. N204 166 32/4313 [2007-2009] Otrzymywanie mezoporowatych struktur typu SBA-15 o hierarchicznym systemie porów, przy użyciu nanocząstek węgla lub lateksu, jako szablonów strukturalnych	81
14. N204 122 32/3142 [2007-2010] Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych w samoorganizujących się układach do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów	82
15. N N204 149433 [2007-2010] Wpływ atomu centralnego (P, Si) oraz atomu addenda (W, Mo) w solach srebrowych heteropolikwasów o strukturze Keggina na bezpośredni rozkład tlenków azotu NO _x	83
16. N N204 248634 [2008-2011] Kompleksy surfaktantów kationowych o złożonej strukturze cząsteczkowej z polimerami jonowymi jako elementy budowy nanostruktur	84
17. N N204 2490 4 [2008-2011] Badanie heterogenizowanych chiralnych kompleksów rutenu w katalitycznym enancjoselektywnym uwodornieniu ketonów	85
18. N N204 217734 [2008-2009] Fotokatalityczny rozkład wody poza atmosferą Ziemi. Przykład wykorzystania katalizy w misjach badania Układu Słonecznego	86 87
19. 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	

Projekty badawcze promotorskie

1. N204 162 31/3659 [2006-2008] Nowe metody syntezy kryształów zeolitów typu MFI, FAU i BEA z multimodalnym systemem porów i ich wykorzystanie jako nowych nanomateriałów dla procesów katalitycznych	91
2. N205 048 31/2120 [2006-2008] Układy multimodalne o podwyższonych właściwościach kwasowych jako podstawa nowych układów katalitycznych	92
3. N204 180 31/3999 [2006-2008] Badanie właściwości centrów Cu(I) w zeolitach typu fojazytu i MFI i ich oddziaływań z cząsteczkami metodami chemii kwantowej i metodami hybrydowymi	93
4. N204 012 31/0279 [2006-2008] Określenie czynników determinujących powstawanie kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych	94
5. N204 150 32/3822 [2007-2009] Określenie wpływu zaadsorbowanych polielektrolitów na kinetykę osadzania i topologię monowarstw cząstek	95
6. N N204 2145 33 [2007-2009] Osadzanie modelowych mikrokapsulek na powierzchniach metalicznych modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitów	96
7. N N204 1238 33 [2007-2009] Transformacje węglowodorów terpenowych na katalizatorach zeolitycznych	97
8. N N205 0189 34 [2008-2010] Wpływ modyfikacji gęstości elektronowej katalizatora na jego aktywność w procesach utleniania węglowodorów	98
9. N N204 2559 34 [2008-2010] Enkapsulacja substancji aktywnych w rdzeniach emulsyjnych	99

Projekty badawcze habilitacyjne

1. N204 173 31/3823 [2006-2008] Mechanizmy reakcji na mononuklearnych centrach żelazowych i manganowych w niehemowych enzymach aktywujących tlen **101**

Projekty badawcze POL POST DOC

1. Epitaksjalne nanostruktury tlenkowe na metalicznych podłożach monokrystalicznych [2006-2009] **107**
2. Ustalenie norm dopuszczalnych fluktuacji mikroklimatu dla drewna polichromowanego [2006-2009] **108**
3. Nowe chiralne kompleksy Ru(II): synteza i zastosowanie w katalizie asymetrycznej w układach homogenicznych i heterogenizowanych na mezoporowatych nośnikach [2006-2009] **109**

Projekty badawcze zamawiane

1. PZB-KBN-116/T09/2004 [2005-2008] Nowe materiały katalityczne jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska (KOORDYNACJA) **113**
2. PBZ-MEiN-2/2/2006 [2007-2010] Chemia perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla **116**
3. 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 **117**
4. PBZ-3/3/I-1.2b [2008] Nowoczesne technologie oraz zaawansowane materiały i wyroby w zrównoważonym rozwoju przemysłu metali nieżelaznych **118**

KRAJOWE SIECI BADAWCZE

1. SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce **121**
2. PV-TECH Rozwój nowych technologii i technik badawczych w dziedzinie krzemowych fotoogniw **122**
3. BIONAN Molekularne mechanizmy oddziaływań w nanoukładach biologicznych oraz w układach aktywnych biologicznie modyfikowanych nanocząstkami **123**
4. ARTMAG Nanostruktury magnetyczne do zastosowania w elektronice spinowej **124**

INICJATYWA TECHNOLOGICZNA I

1. Opracowanie nowej bezopdadowej technologii otrzymywania cykloheksanolu/ /cykloheksanonu (półproduktów do syntezy Nylonu 6 i/lub Nylonu 66) z benzenu poprzez cykloheksen [2008-2010] **127**

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty 6. Programu Ramowego UE

1. EC 6th FP TOK-CATA [2004-2008] Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts (ToK-KOORDYNACJA) **131**
2. EC 6th FP ACENET ERA-NET [2004-2009] ERA-NET for Applied Catalysis in Europe (CA) **132**
3. EC 6th FP IDECAT [2005-2009] Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production (NoE) **133**

4. EC 6th FP SSP-4 SSPI-CT-2004-022695 SENSORGAN [2006-2008] Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organ (STREP) **134**
5. EC 6th FP ERA-NET MATERA Projekt NANOMEDPART [2007-2010] Multifunctional Particulate System for Nanomedicine (SPR-KOORDYNACJA) **135**
6. EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt PARFUN [2008-2011] Nanoscale Surface Treatments to Functionalise Polymer Particles for Electronic Application (SPR) **136**
7. EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt NANOREP II [2008-2011] Multifunctional Surface Coatings and Highly Scratch Resistant Plastic Parts (SPR) **137**

Projekty 7. Programu Ramowego UE

1. EC 7th FP SCP7-GA-2008-218447 InGAS [2008-2011] Integrated Gas Powertrain – Low Emission, CO₂ Optimised and Efficient CNG Engines for Passenger Cars and Light Duty Vehicles (CP) **141**
2. EC 7th FP MUST [2008-2011] Multi-level protection of materials for vehicles by "smart" nanocontainers (CP) **142**
3. EC 7th FP 212939 SMOOHS [2008-2011] Smart Monitoring of Historic Structures (FRP) **143**

Projekty EU COST Action

1. EC COST D36 [2006-2011] Molecular Structure-Performance Relationships at the Surface of Functional Materials **147**
2. EC COST D43 [2006-2011] Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology **148**
3. EC COST IE0601 [2006-2011] Wood Science for Conservation of Cultural Heritage **149**
4. EC COST P21 [2006-2010] Physics of Droplets **150**

Projekty Mechanizmu Finansowego EOG

1. PL0084 [2007-2010] NOM Remove Effective Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment **155**
2. PL0086 [2007-2010] Establishing Standards for Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood **156**

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. GDRE Francja [2007-2010] Development of a new, enzyme-based technology for engineering selectively permeable, nano-structured membranes (w ramach) **159**
2. ECO-NET 2007 Francja [2007-2008] IUP Casein Polyelectrolyte Multilayer Films **160**
3. GDRI Francja [2007-2010] Catalysis for Environment: Depollutiation, Renewable Energy and Clean Fuels
4. Projekt międzyrządowy Polski i Hiszpanii [2007-2009] Nanostructural Micro/Mesoporous Materials as New Catalysts for the Production of Environmentally Friendly Diesel Fuel **161**
5. NANO Japonia [2007-2008] The Development of a Substitute Ru Catalyst Based on Ni Catalyst by Improving Resistance for Carbon Deposition and Ni Sintering **162**
6. Projekt międzyrządowy Polski i Rosji [2008-2009] Electrostatic Interaction of Colloidal Particles Nearby to Charged Surface
7. Współpraca nieformalna z Brookhaven National Laboratory [2007-2009] Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO₂ and Pt-Rh-SnO₂ Electrocatalysts for Ethanol Oxidation **163**

PROJEKTY FUNDUSZY STRUKTURALNYCH UE

- | | |
|---|------------|
| 1. SPO WKP 1.4.1. [2005-2008] TECHKON Wdrożenie technologii cementu romańskiego do praktycznej konserwacji zabytków | 159 |
| 2. SPO WKP 1.4.2. [2006-2008] CeZaŚ Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska | 160 |
| 3. SPO WKP 1.4.1 [2007-2008] IGNIS Konserwatorskie systemy grzewcze dla zabytkowych kościołów | 161 |
| 4. SPO IG 1.1.2 [2008-2012] MPD Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures | 162 |

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘC INSTYTUTU W ROKU 2008

W ROKU 2008:

realizowano:	6 tematów statutowych – 28 zadań badawczych 36 projektów badawczych (grantów) KBN-MNiI-MEiN-MNiSzW (w tym 11 promotorskich, 1 habilitacyjny, 4 zamawiane, 3 Pol Post Doc) 4 sieci naukowe 10 projektów programów ramowych Unii Europejskiej (w tym: 7 projektów 6. PR i 3 projekty 7. PR), 2 projekty koordynowane 2 projekty Mechanizmy Finansowego EOG 4 projekty UE COST Action 7 innych projektów międzynarodowych 4 projekty Funduszy Strukturalnych UE
opublikowano:	13 prac przeglądowych i rozdziałów w monografiach 101 prac naukowych w czasopismach naukowych o cyrkulacji międzynarodowej 9 prac w innych w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji oraz w pismach popularno-naukowych 28 prac w recenzowanych materiałach konferencyjnych 196 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	3 książkowe materiały konferencyjne (z nr ISBN)
wyłożono i zaprezentowano:	102 referaty i komunikaty (w tym 26 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 176 posterów
uzyskano: zgłoszono	3 patenty (w tym 2 za granicą) 3 zgłoszenia patentowe (w tym 2 za granicą)
we współpracy z zagranicą:	realizowano 27 tematów opublikowano 42 wspólne prace w czasopismach naukowych i 12 w recenzowanych materiałach konferencyjnych ogłoszono 34 komunikaty w materiałach konferencyjnych zrealizowano 133 wyjazdy pracowników Instytutu za granicę z zagranicy przyjechało 35 osób
zorganizowano:	5 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki spotkanie z noblistą prof. G.Ertlem
tytuł profesora:	uzyskała 1 osoba
stopień doktora habilitowanego	uzyskały 4 osoby (2 spoza Instytutu)
stopień doktora:	uzyskało 5 osób (1 spoza Instytutu)

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2008:

Właściwości strukturalne i elektronowe metalicznych centrów aktywnych w materiałach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne

(prof. Ewa Broclawik, dr Paweł Rejmak)

Zastosowanie nowej metody teoretycznej doprowadziło do ilościowego opisu procesów donacji i donacji zwrotnej dla benzenu oddziałującego z centrum miedziowym w zeolicie, jakie do tej pory były trudne do uchwycenia.

Badania miały na celu ilościową analizę przepływów gęstości elektronowej towarzyszącej aktywacji cząsteczki związanej przez katalityczne centrum aktywne. Sumaryczna zmiana ładunków na fragmentach cząsteczki nie daje pełnego obrazu przepływu gęstości elektronowej, gdyż może być wypadkową kilku procesów, które mogą mieć jakościowo różny efekt dla aktywacji poszczególnych wiązań. Znane dotąd procedury numeryczne służące analizie rozkładu ładunków atomowych w cząsteczce nie dają możliwości rozkładu zmian populacji elektronowych (na skutek oddziaływania cząsteczki z centrum aktywnym lub/i innym układem cząsteczkowym) na przyczynki ilościowo opisujące procesy donacji i donacji zwrotnej czy też przepływów o symetrii typu σ i π . Wobec tego całkowite zmiany ładunku często nie korelują ze stopniem aktywacji wiązań.

Badania nasze oparte są na nowej metodzie teoretycznej "orbitali naturalnych dla wartościowości chemicznej (NOCV), zaproponowanej i opublikowanej przez A. Michalaka i M. Mitoraja w 2007 roku. Orbitalne NOCV opisują rozkład przestrzenny elementarnych przepływów gęstości elektronowej (kanałów) a ich wartości własne opisują udział danego kanału w całkowitym przepływie gęstości.

Wyniki tej analizy pokazują zarówno jakościowo (kształt orbitali naturalnych), jak i ilościowo (wartości własne) rodzaj przepływów elektronowych zachodzących w danym procesie. Dla cząsteczki benzenu oddziałującej z centrum miedziowym w zeolicie analiza ta pokazała, że mimo znikającego całkowitego przepływu elektronów, proces ten jest wypadkową donacji (od cząsteczki do centrum aktywnego) i donacji wstecznej (od centrum do cząsteczki), które są istotne, ale znoszą się wzajemnie.

Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe zawierające kazeinę

(dr Lilianna Szyk-Warszyńska, dr Ewelina Jarek, dr Rrobert Socha, prof. Piotr Warszyński)

Za pomocą pomiarów elipsometrycznych "in-situ" w komorze przepływowej pokazano, że metodą sekwencyjnej adsorpcji możliwe jest utworzenie wielowarstwowych filmów utworzonych z biokompatybilnego polikationu, poli-L-lizyny i nieustrukturyzowanej proteiny α - lub β -kazeiny. Wyniki pomiarów grubości i kinetyki tworzenia filmów na płytkach krzemowych, wskazują na większy przyrost grubości filmów podczas adsorpcji kazeiny niż polielektrolitu. Wielkość tego przyrostu była zgodna z molekularnym rozmiarem kazeiny, tj. większy przyrost towarzyszył adsorpcji α -kazeiny niż β -kazeiny, co dobrze odzwierciedla różnicę w rozmiarach obu form kazeiny (α -kazeina - 9nm, β -kazeina - 7 nm). Podobny trend był obserwowany dla filmów badanych na sucho. Pomiary XPS filmów PLL/kazeina wykazały, że kazeina zawarta w filmach wielowarstwowych zachowuje zdolność do wiązania jonów Ca^{2+} , przy czym zgodnie z przewidywaniami zdolność ta była większa dla α -kazeiny. Filmy wielowarstwowe zawierające kazeinę mogą znaleźć zastosowanie przy modyfikacji powierzchni implantów dentystycznych lub jako warstwy ochronne dla materiałów dla przemysłu mleczarskiego.

Prace te były prowadzone w ramach międzynarodowego projektu ECO-NET "IUP Casein Polyelectrolyte Multilayer Films".

Teoretyczne modelowanie procesu selektywnej redukcji tlenków azotu

(prof. Małgorzata Witko, dr Paweł Hejduk)

Osiągnięciem wykonanych badań jest określenie procesu aktywacji cząsteczki NH_3 na niskoindeksowych powierzchniach V_2O_5 , w szczególności na podaniu mechanizmu aktywacji i geometrii cząsteczki reagenta.

Katalizatory na bazie V_2O_5 używane są m.in. do redukcji tlenków azotu (procesy de- NO_x) w obecności amoniaku w reakcji selektywnej katalitycznej redukcji (SCR). Postuluje się, że pierwszym etapem reakcji jest aktywacja amoniaku na powierzchniowych centrach kwasowych bądź to Lewisa (kationy wanadu) w postaci V-NH_3 lub V-NH_2 , bądź Brønsteda (powierzchniowe grupy OH) w postaci V-O-NH_4^+ .

Zbadano aktywność katalityczną grup OH występujących na trzech niskoindeksowych powierzchniach: (010), (001) oraz (100) V_2O_5 w procesie aktywacji amoniaku, jako etapu wstępnego reakcji SCR. Wcześniej określono aktywność każdej powierzchni w procesie molekularnej i dysocjatywnej adsorpcji cząsteczek wody. Obliczenia wykonano metodą ab-initio DFT, w przybliżeniu nielokalnym (GGA-RPBE). Jako modeli użyto powierzchniowych klasterów, w których zerwane wiązania wysycono atomami wodoru.

Wyniki obliczeń wskazują, że NH_3 ulega stabilizacji (energie adsorpcji w przedziale od -0.3 eV do -3 eV) na powierzchniowych grupach OH badanych powierzchni V_2O_5 z utworzeniem wiązań wodorowych według dwóch mechanizmów, gdzie donorem protonu jest bądź grupa hydroksylowa bądź jon amoniowy. Może utworzyć się jedno, dwa a nawet trzy wiązania wodorowe. W większości przypadków produktem adsorpcji jest jon NH_4^+ ; jon ten nie tworzy się na powierzchniach (001) i (100) w okolicy centrum tlenowego O(2). Ponieważ obecność powierzchniowych jonów amonowych NH_4^+ umożliwia aktywację gazowego NO_x , zatem w procesie redukcji NO_x mogą brać udział zarówno powierzchnia wysycona (010), jak i powierzchnie niewysycone (100) i (001). Udział tych ostatnich wynika z większego prawdopodobieństwa tworzenia się na nich grup hydroksylowych koniecznych do aktywacji amoniaku.

Pd-funkcjonalizowane żywice, katalizatory selektywnego uwodorniania wiązań $\text{C}\equiv\text{C}$ do $\text{C}=\text{C}$

(doc. Alicja Drelinkiewicz, mgr Anna Knapik, mgr Wojciech Stanuch)

Uwodornianie 2-butyne-1,4-diolu (B3-D) jest typową reakcją obejmującą uwodornianie wiązań nienasyconych $\text{C}\equiv\text{C}$ do $\text{C}=\text{C}$ i $\text{C}-\text{C}$. Jest to reakcja o znaczeniu przemysłowym, gdyż produkty częściowego i pełnego uwodornienia są surowcami w wytwarzaniu polimerów i witamin. W obecnych badaniach opracowano katalizatory typu „egg-shell” zawierające pallad osadzony w żywicy funkcjonalizowanej grupami di-aminowymi. Wynikiem obecności tych grup, jak i odpowiedniej mikroporowatości utworzonej w spęcznionej żywicy (zachodzi w środowisku w trakcie reakcji katalitycznego uwodorniania) uzyskano bardzo aktywne katalizatory w obecności, których uwodornianie wiązań alkynów ($\text{C}\equiv\text{C}$) do alkenów ($\text{C}=\text{C}$) zachodziło z bardzo wysoką selektywnością ~ 98 %. Umożliwia to łatwe uzyskanie istotnych technologicznie produktów uwodornienia B3-D z odpowiednio wysoką wydajnością.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2008:

Prace organizacyjne

W roku 2008 zorganizowano 5 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu, stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki oraz spotkanie z noblistą prof. G. Ertlem (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 14 listopada 2008

Główną ideą zorganizowania w dniu 16 października 2007, corocznego, szóstego 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 700 osób. Odwiedzający mieli okazję wysłuchać następujące wykłady:

- A. Bielański "Krzem – pierwiastek, któremu zawdzięczamy Internet"
- J.Korecki "Jak się przeświecić, to tylko w synchrotronie"
- R.Kozłowski "Na ratunek arcydziełu z kraju samurajów"
- P.Weroński "Mewtwo – marzenie czy rzeczywistość? O projektowaniu sztucznego życia"
- P.Nowak "Jak ukraść energię Słońcu?"
- J.Szeleniec, M.Szaleniec "Zrozumieć i stworzyć – jak projektujemy leki?"
- J.Barbasz "Świat w nanoskali"
- M.Łukomski "Obrazy mistrzów w zbliżeniu"
- R.Gryboś "Kataliza w Kosmosie"
- A.Pacuła "Różne wcielenia węgla i ich zastosowania"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Czym można zastąpić krew, czyli rozpuszczalniki fluorowe w katalizie homogenicznej
- Chemia komputerowa, czyli jak obliczenia wzbogacają wiedzę na temat procesów katalitycznych
- Adsorpcja i jej zastosowania
- Czy czarne może być kolorowe?
- Powierzchnia, cienkie warstwy i nanostruktury
- Badania produktów wybuchu wulkanu metodą dyfrakcji rentgenowskiej
- Liofilizacja, czyli sposób na dobry katalizator, kawę rozpuszczalną i jedzenie dla aktywnych
- Natura inspiruje
- Po co badać procesy osadzania?
- Zwilżalność – które powierzchnie lubią wodę?
- Mikro i Nano świat widziany w elektronowym mikroskopie skaningowym
- Jak kataliza pomaga chronić środowiska?
- Jak działają surfaktanty ?
- Magiczne nanomateriały
- Temperatura, ciśnienie i my
- Ciekawe doświadczenia chemiczne

Wykłady popularno-naukowe

1. A.Bielański "Woda, związek bardzo pospolity", Festiwal Nauki, Kraków 2008
2. A.Bielański "Prof. Adam Skąpski - od Krakowa do Lagos", Komisja Historii Nauki Polskiej Akademii Umiejętności, Kraków 2008

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych (załączono odpowiednie materiały)

1. 40th Annual Polish Conference on Catalysis 'Catalysis for Society', Kraków, May 11th-15th, 2008 (M.Witko)
2. 15. Forum Zeolitowe, Kocierz, 16-21 czerwca 2008 (M.Derewiński)
3. 22nd Conference of the European Colloid and Interference Society ECIS 2008, Kraków, August 31st-September 5th, 2008 (Z.Adamczyk)
4. COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków, September 2nd-September 4th, 2008 (K.Małysa)
5. Workshop 'X-Ray Techniques in Investigations of the Object of Cultural Heritage' (in frames of 11th European Powder Diffraction Conference), Kraków, September 18th-19th, 2008 (R.Kozłowski, W.Łasocha)

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

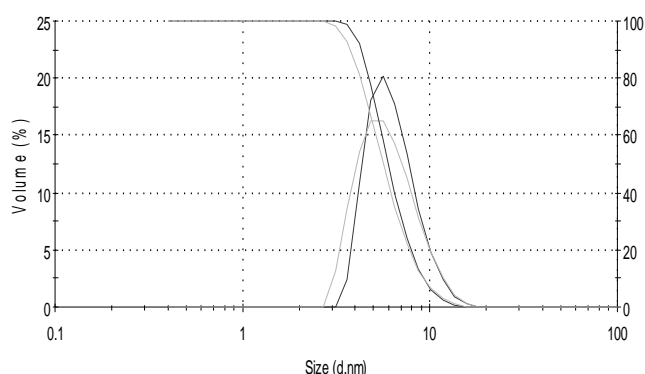
1.1. Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów i ich wykorzystanie jako precursory w preparatyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdzielania

(doc. Mirosław Derewiński, mgr Anita Burkat-Dulak, mgr Veronika Pashkova, mgr Jerzy Podobiński, mgr Adam Węgrzynowicz)

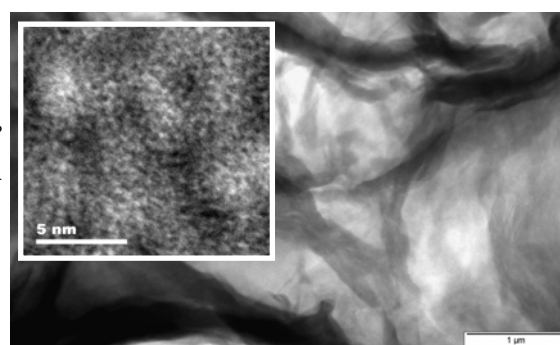
Wraz z odkryciem krzemianowych materiałów mezoporowatych typu M41S, zostały podjęte intensywne badania, których celem było wygenerowanie w tych materiałach silnych centrów kwasowych, m.in. przez wytworzenie/osadzenie w nich nanostruktur zeolitowych. Tak zmodyfikowane preparaty łączyłyby w sobie wysoką dostępność struktury charakterystyczną dla materiałów mezoporowatych, z aktywnością i selektywnością działania typową dla glinowkrzemianowych sit molekularnych. Generowanie właściwości kwasowych w układach mezoporowatych może być realizowane w różny sposób, m.in. poprzez osadzenie w strukturze mezoporowatej fazy aktywnej w postaci nanocząstek zeolitu, w wyniku częściowej rekryształizacji wyjściowego materiału amorficznego w mikroporowate struktury krystaliczne czy wreszcie poprzez bezpośrednią syntezę materiałów mezo-/makroporowatych z przygotowanych wcześniej układów protozeolitycznych, tj. ugrupowań o wielkości rzędu kilku/kilkunastu nanometrów. W podjętych badaniach zastosowano ostatni z wymienionych wyżej sposobów, wykorzystując cząstki protozeolityczne typu MFI, jako prekursory w syntezie amorficznej struktury mezoporowatej.

Opracowano procedurę preparatyki stabilnych zawiesin układów protozeolitycznych MFI o wielkości cząstek poniżej 10 nm, tj. rzędu 3÷5 komórek elementarnych. Syntezy zatrzymywano, gdy wielkość cząstek głównej frakcji wynosiła około 8 nm (Rys.1). Obecność uporządkowania typowego dla struktur zeolitowych potwierdzano w oparciu o analizę drgań strukturalnych metodą spektroskopii w podczerwieni i ich porównanie z widmami IR drgań czystego zeolitu MFI oraz materiału amorficznego. W drugim etapie preparatyki, otrzymane układy protozeolityczne wykorzystywane były w syntezie materiału mezoporowatego, w obecności heksadecyloaminy jako matrycy.

Badania sorpcji azotu wykazały, wysoką powierzchnię właściwą otrzymanych materiałów (powyżej 1000 m²/g) oraz obecność mezoporów o wielkości około 2 nm. Analiza mikroskopowa SEM wykazała, że otrzymane materiały składają się z ultracienkich warstw. Badania TEM potwierdziły lamelarną strukturę preparatów oraz obecność dużej ilości nieregularnych mezoporów w warstwach (Rys. 2).



Rys. 1. Rozkład wielkości nanocząstek MFI otrzymanej zawiesiny oznaczony metodą DLS (rozkład po 48 godz. syntezy).

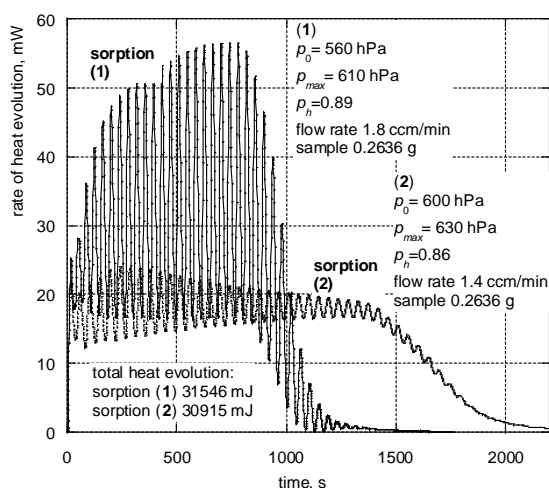


Rys. 2. Zdjęcia TEM materiału lamelarnego otrzymanego na bazie układów protozeolitycznych, posiadającego system nieuporządkowanych mezoporów.

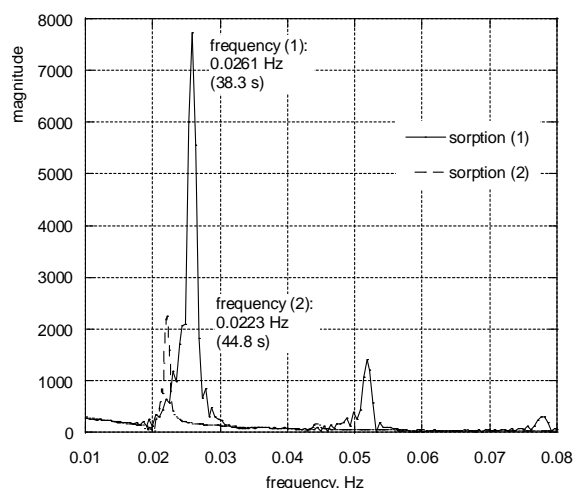
1.2. Oddziaływanie wieloskładnikowych układów zawierających wodór i gaz szlachetny z powierzchnią katalizatorów metalicznych opartych na złocie lub palladzie badane za pomocą mikrokalorymetru przepływowego sprzężonego ze spektrometrem masowym

(prof. Jerzy Haber, dr Erwin Lalik)

Próby zastosowania aktywacji wodorowej dla obniżenia temperatury reakcji utleniania CO na katalizatorze palladowym doprowadziły do nieoczekiwanego spostrzeżenia, że reakcja wodoru z palladem może przebiegać w sposób oscylacyjny pod warunkiem obecności pewnej ilości, około 10%, gazu obojętnego takiego jak argon lub azot w mieszaninie z wodorem. Wstępne badania pokazały, że istotnym warunkiem wystąpienia oscylacji jest również początkowe obniżenie ciśnienia całkowitego w układzie do ok. 600 hPa, które następuje przed wprowadzeniem wodoru. Jest ono uzyskiwane przez współdziałanie układu próżniowego spektrometru z kontrolerami przepływu gazów znajdującymi się przed celką mikrokalorymetru. Oscylacje są głównie widoczne jako cykliczne zmiany prędkości wydzielania ciepła mierzone mikrokalorymetrycznie, towarzyszą im jednak również mniej wyraźne oscylacje ciśnienia cząstkowego wodoru. Mają charakter nieliniowy, tj. nieharmoniczny, periodyczny lub kwaziperiodyczny, nie zaobserwowano natomiast jak dotąd matematycznego chaosu. Niezależnie jednak od charakteru oscylacji całkowite ciepło reakcji wodoru i palladu pozostaje niezmiennie. Rysunek 1a pokazuje dwa przykłady takiego oscylacyjnego przebiegu reakcji katalizatora palladowego z wodorem w obecności azotu dla różnych warunków ciśnienia, prędkości przepływu oraz ułamka molowego wodoru. Rysunek 1b przedstawia transformaty Fouriera obu oscylacyjnych krzywych, które pokazują, że oba przebiegi mają charakter periodyczny, to znaczy wykazują pojedynczą częstość drgań.



Rys. 1a



Rys. 1b

Dotychczasowa literatura naukowa nie zawiera doniesień o oscylacyjnym charakterze reakcji wodoru z katalizatorem Pd, chociaż same oscylacje reakcji utleniania CO nad Pd są przedmiotem licznych badań. Spostrzeżenie oraz wstępne wyznaczenie warunków zachodzenia oscylacji w reakcji wodoru z palladem nosi więc znamiona odkrycia naukowego, które może mieć istotny wpływ na zrozumienie innych procesów katalitycznych zachodzących z udziałem wodoru na palladzie. Odkrycie oscylacyjnego reżimu reakcji wodoru z palladem może również wnieść istotny aspekt do badań nad możliwością magazynowania wodoru w palladzie lub jego stopach.

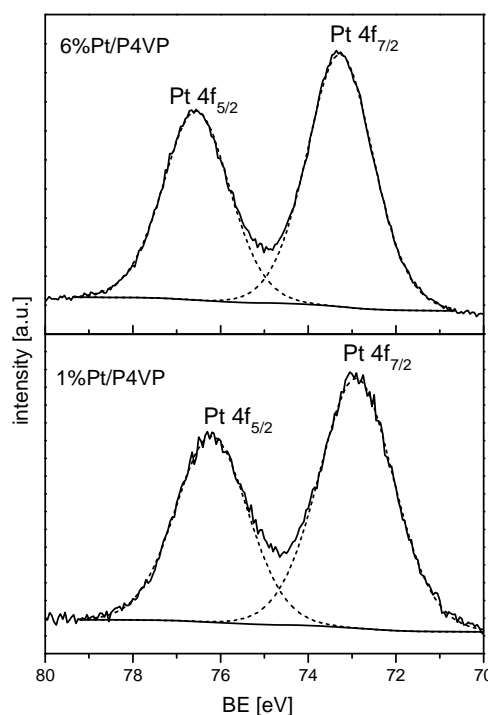
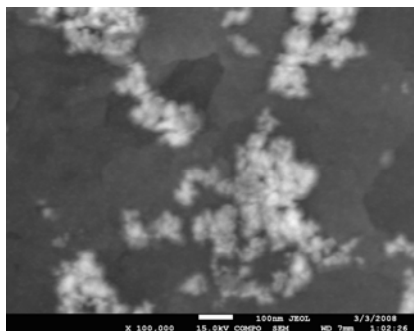
1.3. Właściwości fizykochemiczne i katalityczne układów Pt-polimery

(doc. Alicja Drelinkiewicz, mgr Adam Zięba, dr Janusz W. Sobczak [IChF PAN],
prof. Ewa Sobczak [IF PAN])

Dane literaturowe pokazują, że głównie badane były katalizatory zawierające Pd-zdyspergowany w matrycy PVP. W obecnej pracy podjęto badania nad katalizatorami platyna-poli(4-winylopirydyna) (Pt/P4VP). Obecność jednostek pirydynowych w P4VP sprawia, że mogą one być centrami koordynacji dla jonów platyny, podobnie jak obserwowano dla jonów Pd, Cu, Ni i Co. Obecnie, syntezę katalizatorów (1%-6% Pt) prowadzono z roztworu kwasu H_2PtCl_6 o $\text{pH}=1.8$. W tych warunkach, istnieje możliwość wprowadzenia jonów $[\text{PtCl}_6]^{2-}$ jako przeciwjonów, jak i ich koordynacji przez P4VP. Katalizatory Pt/P4VP charakteryzowane były metodami FTIR, Raman, XPS, EXAFS i mikroskopii elektronowej. W oparciu o wyniki FTIR, Raman i EXAFS stwierdzono, że w reakcji P4VP z H_2PtCl_6 następowało protonowanie jednostek pirydynowych i wprowadzanie jonów $[\text{PtCl}_5(\text{H}_2\text{O})]$ jako przeciwjonów. Jony te są dominujące w roztworze prekursora. Udział jednostek pirydynowych w koordynacji Pt był znikomy. Metodą XPS stwierdzono, że powierzchniowe Pt-kompleksy wzbogacone są w ligandy $\text{H}_2\text{O}/\text{OH}^-$ co było wynikiem hydrolizy kompleksów zachodzącej w trakcie przemywania katalizatorów. W wyniku redukcji Pt/P4VP (NaBH_4) uzyskano katalizatory, w których stężenie powierzchniowe Pt było wysokie (XPS), wyższe niż wynikające ze stechiometrycznego składu. W zredukowanych katalizatorach obecne były nano-cząstki Pt (2-6 nm), jednakże ulegały one agregacji w różnym stopniu z utworzeniem większych zespołów (20-100 nm) o nieregularnych kształtach. Agregacja zachodziła zarówno przy niskiej (1 wt% Pt) jak i wysokiej (6 wt% Pt) zawartości Pt. Wskazuje to na niedostatecznie wysokie zdolności stabilizacyjne polimeru, P4VP.

Aktywność katalizatorów Pt/P4VP (1, 4, 6 wt% Pt) w reakcji uwodorniania 2-butyn-1,4-diolu (B3-D) malała ze wzrostem zawartości Pt, co wiązano ze zmianą stężenia powierzchniowego Pt jak i stopnia agregacji cząstek Pt. Selektyność uwodorniania $\text{C}\equiv\text{C}$ w B3-D do alkenu, 2-buten-1,4-diolu była podobna jak dla typowych Pt katalizatorów nośnikowych, ok. 75 %. Jednakże w odróżnieniu od tych typowych katalizatorów, w obecności Pt/P4VP przere-agowanie B2-D do produktów ubocznych było bardzo niskie (10 %). Ten korzystny efekt był wynikiem zasadowego charakteru P4VP.

Analiza XPS i obraz mikroskopowy katalizatorów Pt/P4VP



1.4. Właściwości strukturalne i dynamika w epitaksjalnych nanostrukturach metalicznych i tlenkowych badane z użyciem skaningowej mikroskopii tunelowej i promieniowania synchrotronowego.

(prof. Józef Korecki, dr Nika Spiridis, dr Jacek Gurgul, dr Robert Socha, dr inż. Dorota Wilgocka-Ślęzak, mgr Kinga Freindl, mgr Ewa Zackiewicz).

Nanostruktury na wycynalnych powierzchniach metali

Powierzchnie wycynalne charakteryzujące się regularną strukturą stopni są idealnymi podłożami dla zorganizowanego wzrostu nanostruktur. Modulacja morfologii nanostruktur nanoszonych na takie podłoża pozwala na otrzymywanie materiałów o nowych właściwościach, takich jak na przykład magnetyczne nanostruktury z silną prostopadłą anizotropią magnetyczną, ważne dla zastosowań spintronicznych. Badania koncentrowały się na modelowaniu anizotropii magnetycznej ultracienkich warstw kobaltu nanoszonego na powierzchni wycynalne. Jako podłoże monokrystaliczne stosowany był kryształ z dwiema powierzchniami, W(110)/W(540), z naniesioną buforową warstwą złota. Użycie takiego kryształu pozwoliło na bezpośrednie porównanie w jednym eksperymencie właściwości magnetycznych kobaltu naniesionego na podłoże płaskie i ze stopniami. Stwierdzono, że dla kobaltu naniesionego na podłoże wycynalne, prostopadłą strukturę namagnesowania daje się stabilizować aż do grubości 8 nm, w porównaniu z 2 nm dla powierzchni płaskiej. Co więcej, przemagnesowanie dało się wywołać zarówno polem prostopadłym, jak i polem w płaszczyźnie warstwy. W oparciu o zmierzone dane eksperymentalne zaproponowano prosty model opisujący magnetyczne właściwości warstw Co na podłożu ze stopniami. Model ten może być stosowany dla szerokiej klasy cienkich warstw magnetycznych pozwalając kontrolować prostopadłą anizotropię magnetyczną i prostopadłe namagnesowanie.

Adsorpcja gazów na powierzchni monowarstwy Fe/W(110)

Symetria translacyjna ładunków jonowych i elektronowych ulega złamaniu na powierzchni kryształu, co znajduje odzwierciedlenie w takich fundamentalnych cechach jak praca wyjścia, stany elektronowe i fononowe, relaksacja, rekonstrukcja, a także reaktywność. Na właściwości powierzchni mogą także silnie wpływać zaadsorbowane gazy resztkowe, czego przykładem są magnetyczne właściwości ultracienkich warstw Fe na wolframie. Adsorpcja gazów resztkowych, wyjątkowo silna w tym układzie ze względu na strukturę naprężonej, pseudomorficznej monowarstwy Fe, powoduje przełączenie magnetyzacji z kierunku prostopadłego do kierunku w płaszczyźnie warstwy. Podjęto systematyczne badania mające na celu głębsze zrozumienie procesów adsorpcji gazów resztkowych i gazów celowo dozowanych do układu. Wpływ adsorpcji gazów na właściwości elektronowe monowarstwy Fe badany był w warunkach ultrawysokiej próżni, in-situ, z wykorzystaniem jądrowego rezonansowego rozpraszania (NRS) promieniowania synchrotronowego w ID 18, ESRF Grenoble. Widma czasowe NRS zależą od gradientu pola elektrycznego (EFG) na powierzchni, co daje informację strukturalną. Zaobserwono, że orientacja tensora EFG zależy od czasu pomiędzy przygotowaniem próbki, a pomiarem. Adsorpcja powoduje stopniowe odchylenie osi głównej EFG od kierunku prostopadłego do warstwy.

Badaliśmy także adsorpcję CO, O₂ i N₂ na monowarstwie Fe/W(110) przy użyciu LEED i XPS, konstruując izotermę adsorpcji w szerokim zakresie temperatury i ciśnienia.

Powierzchniowe badania materiałów z wykorzystaniem spektroskopii elektronowej

W ramach działalności statutowej, Laboratorium Powierzchni i Nanostruktur przeprowadziło liczne analizy XPS dla różnych grup badawczych IKiFP. Wykonano 53 analizy, co stanowi 1/3 działalności Laboratorium.

1.5. Materiały mezoporowate jako nanoreaktory katalityczne

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, doc. Alicja Drelinkiewicz, dr Dorota Duraczyńska, dr Małgorzata Zimowska, dr inż. Alicja Michalik-Zym, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, dr Zbigniew Olejniczak [IFJ PAN])

Mezoporowate materiały krzemionkowe otrzymywane przy użyciu szablonów strukturalnych mają ogromne znaczenie praktyczne, ze względu na możliwość ich zastosowań jako adsorbenty, sita molekularne i katalizatory. Ich cechą charakterystyczną jest obecność uporządkowanych przestrzennie jednorodnych porów o dającej się kontrolować średnicy (najczęściej 2-10 nm), bardzo duża powierzchnia właściwa (powyżej 700 m²/g) oraz stabilność termiczną do 800-900°C. Ze względu na rozmiary porów materiały te mogą być stosowane jako nośniki dla aktywnych katalitycznie substancji, w których znaczne rozmiary cząsteczek wykluczają osadzenie ich wewnątrz porów konwencjonalnych nośników mikroporowatych typu zeolitów. W układach takich reakcja katalityczna zachodzi w nanoprzestrzeni (nanoreaktorze) wyznaczonej przez ścianki poru otaczającego centrum katalityczne, co może modyfikować przebieg reakcji katalitycznej. W ramach realizowanego zadania postanowiono osadzić 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, na heksagonalnych sitach molekularnych typu HMS(Si/Al=40) oraz HMS(Si/Al=20), oraz zbadać właściwości katalityczne tak otrzymanych katalizatorów.

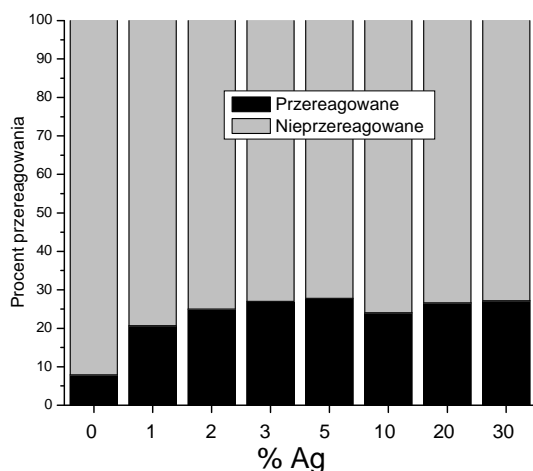
Do naniesienia kompleksu wykorzystano metodę wymiany jonowej. Metoda ta nie wymaga modyfikacji powierzchni nośnika lub ligandów w związkach kompleksowych oraz pozwala na przeprowadzenie procesu immobilizacji w niskich temperaturach i przy obojętnym pH, co ma decydujący wpływ na stabilność związków metaloorganicznych. Otrzymane katalizatory heterogeniczne zostały scharakteryzowane za pomocą spektroskopii XPS, UV-Vis, NMR (²⁷Al i ²⁹Si), FTIR, wykonano analizę termiczną i rentgenowską dyfrakcję proszkową oraz przeprowadzono badania sorpcyjne. Zmniejszenie się pola powierzchni i objętości porów nośnika przed i po osadzeniu (analiza sorpcyjna) pokazało, że kationy kompleksu Ru (II) znajdują się wewnątrz porów nośnika. Ponadto, podczas procesu heterogenizacji nie ulega zmianie struktura nośnika (XRD, NMR) ani związku osadzanego (XPS, UV-Vis). Do badań testowych wybrano katalityczne uwodornienie fenyloacetyleny do styrenu i etylobenzenu. Badania pokazały, że otrzymane katalizatory są aktywne w ww. reakcji w 40°C i przy atmosferycznym ciśnieniu wodoru (tabela poniżej). Ponadto badano wpływ stężenia aktywnej fazy katalizatorów heterogenicznych na ich aktywność katalityczną. Okazało się, że zwiększenie ilości fazy aktywnej wpływa negatywnie na szybkość uwodornienia fenyloacetyleny. Wszystkie katalizatory są stabilne w warunkach katalizy, łatwo je odzyskać z mieszaniny reakcyjnej oraz zachowują własności katalityczne w kolejnych cyklach uwodornienia.

Katalizator	Szybkość uwodornienia fenyloacetyleny. [mol _{Phac} *min ⁻¹ *g _{com} ⁻¹]	Selektywność do styrenu przy 90% konwersji fenyloacetyleny [%]
1.1 wt% Ru(II)/HMS(Si/Al=20)	128 * 10 ⁻⁵	83
1.1 wt% Ru(II)/HMS(Si/Al=20) powtórne użycie	123 * 10 ⁻⁵	93
2.3 wt% Ru(II)/HMS(Si/Al=20)	49 * 10 ⁻⁵	91
6.1 wt% Ru(II)/HMS(Si/Al=20)	8 * 10 ⁻⁵	88
5.9 wt% Ru(II)/HMS(Si/Al=40)	55 * 10 ⁻⁵	87

1.6. Fotokatalityczne właściwości nanostrukturalnego ditlenku tytanu domieszkowanego metalami przejściowymi i związkami metali przejściowych

(doc. Paweł Nowak, dr Michał Mosiątek, mgr Dawid Wodka, mgr Grzegorz Mordarski)

Rozkład szkodliwych dla środowiska zanieczyszczeń w wodzie, powietrzu i ściekach staje się jednym z najważniejszych zastosowań TiO_2 , w których wykorzystuje się jego foto-indukowaną reaktywność. Podstawowe zalety użycia TiO_2 jako fotokatalizatora to jego niska cena, brak oddziaływań toksycznych i wysoka stabilność chemiczna. Wady to stosunkowo niska wydajność kwantowa oraz konieczność użycia światła ultrafioletowego do wzbudzenia jego aktywności, co spowodowane jest znaczną szerokością przerwy wzbronionej w TiO_2 . Wydaje się, że ten drugi problem można rozwiązać domieszkując TiO_2 jonami metali, co powinno spowodować pozorne zawężenie przerwy wzbronionej. Domieszkowanie powoduje jednak powstawanie centrów rekombinacji par dziura – elektron, co znacząco obniża wydajność kwantową układu. Innym sposobem poszerzenia zakresu aktywności TiO_2 na zakres widzialny jest osadzanie metali przejściowych i ich związków na powierzchni TiO_2 . W porównaniu z innymi metalami srebro ma właściwości istotne z punktu widzenia fotokatalizy: jest nietoksyczne, posiada katalityczne właściwości w przypadku wielu reakcji (na przykład redukcji O_2), w porównaniu z metalami nieszlachetnymi jest dość odporne chemicznie i tanie w porównaniu z metalami szlachetnymi. Srebro ma znacznie niższą pracę wyjścia niż złoto i platyna, co powoduje, że na styku $\text{Ag} - \text{TiO}_2$ nie tworzy się tak wysoka bariera Schottkey'go jak w przypadku innych metali szlachetnych. W 2008 roku otrzymywano różnymi metodami preparaty TiO_2 domieszkowane powierzchniowo srebrem oraz wodorotlenkami niektórych metali przejściowych (Fe i Ni). Materiałem wyjściowym do tych syntez był handlowy TiO_2 (Degussa P25, $50 \text{ m}^2/\text{g}$). Prowadzono również syntezы TiO_2 metodą hydrotermalną, materiałem wyjściowym był amorficzny TiO_2 otrzymany metodą zol-żel. W tym przypadku przeprowadzano domieszkowanie objętościowe i powierzchniowe. Badano również preparaty TiO_2 oraz inne materiały otrzymane w innych laboratoriach instytutu oraz w innych instytucjach. Aktywność TiO_2 badano mierząc szybkość rozkładu substancji organicznych w roztworach zawierających zawiesinę TiO_2 i naświetlanych światłem widzialnym lub ultrafioletowym. Najlepsze wyniki otrzymano dla TiO_2 Degussa P25 domieszkowanego powierzchniowo Ag. Zaobserwowano znaczną aktywność w zakresie światła widzialnego (Rys. 1). Jest to bardzo istotne, gdyż poszerzenie zakresu aktywności fotokatalitycznej TiO_2 na obszar widzialny jest obecnie jednym z najważniejszych zadań chemii materiałowej.



Rys. 1. Rozkład kwasu szczawowego (stężenie początkowe $5 \times 10^{-4} \text{ mol dm}^{-3}$) pod wpływem światła widzialnego (lampa halogenowa) w zawieszynie (500 mg/dm^3) TiO_2 domieszkowanego powierzchniowo srebrem.

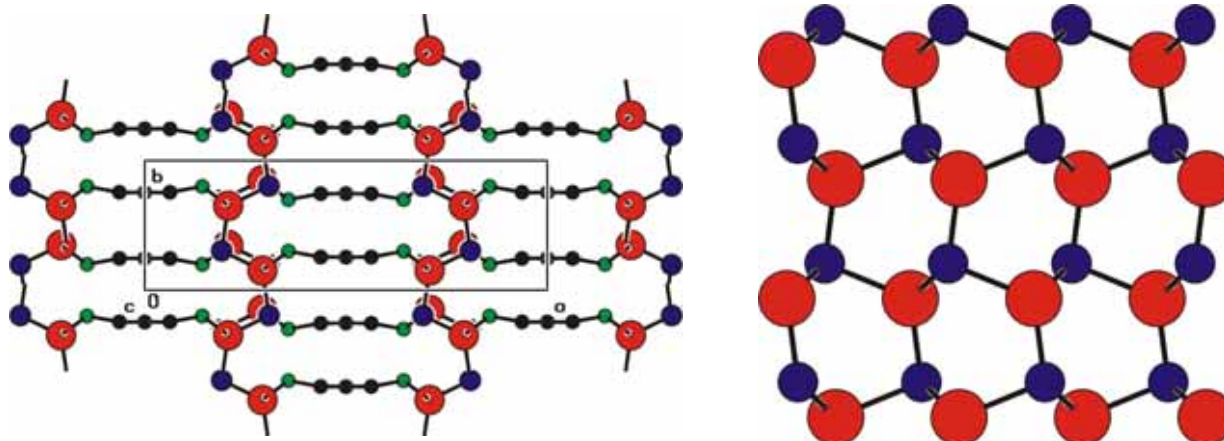
Domieszkowanie przeprowadzono metodą fotoredukcji z użyciem promieniowania ultrafioletowego. Jako materiału wyjściowego użyto TiO_2 Degussa P25. Liczby na osi X oznaczają zawartość Ag w kompozycji (pierwsza kolumna – czysty TiO_2). Wyraźnie widać wyższą aktywność TiO_2 domieszkowanego Ag.

1.7. Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe - synteza i badania strukturalne

(prof. Wiesław Łasocho, dr Maciej Grzywa, dr Bartłomiej Gawel [Wydział Chemii UJ])

Przeprowadzono szereg testów nad uzyskaniem nowych hybrydowych połączeń warstwowych, w których półprzewodnikowe mono-warstwy Me(II)-X(VI) są rozdzielone warstwą diamin. Związki tego typu są interesującymi materiałami dla mikroelektroniki oraz optyki.

Przeprowadzono testy związane z możliwością uzyskiwania związków warstwowych w łagodniejszych warunkach z mniejszym zużyciem energii. Zastosowanie rozkładalnych związków tio-organicznych zamiast pierwiastkowej siarki dało w rezultacie kilkukrotne skrócenie czasu ogrzewania i możliwość syntez pod chłodnicą zwrotną zamiast warunków solwotermalnych. Dla połączenia $Zn_2S_2(NH_2-C_3H_6-NH_2)$ wykonano pełne badania strukturalne na bazie metod proszkowych. Podstawowe dane krystalograficzne, a,b,c,V 19.895(2), 6.4019(7), 6.1987(7) Å, 789.5(1) Å³, SG; C mc2₁, F₂₀=177.



Rys. 1. Uzyskane nowe połączenia warstwowe. Czerwone i niebieskie kulki przedstawiają atomy metalu i siarki, czarne i zielone to atomy węgla i azotu

W drugiej grupie badań prowadzono testy nad uzyskaniem nowych połączeń warstwowych typu pięcio- i siedmiomolibdenianów chloroanilin. W ramach badań uzyskano m.in. nowy, włóknisty trimolibdenian p-chloroaniliny o parametrach sieciowych (15.297(3), 7.586(2), 8.869(2) Å, 101.60(2), V=1008.2(4) Å³, SG; P2₁/m) oraz kilka nowych połączeń molibdenu z kationami organicznymi: amonowo tri(trietyloaminy) oktamolibdenian, tetra(trimetyloaminy) oktamolibdenian dwuwodny, diamono di(trimetyloaminy) oktamolibdenian dwuwodny.

Dla nowych połączeń prowadzono badania fizykochemiczne (spektroskopowe, DSC, badania procesów rozkładu termicznego) oraz strukturalne.

1.8. Zredukowana sól srebrowa heteropolikwasu typu Wellsa-Dawsona jako katalizator bifunkcyjny

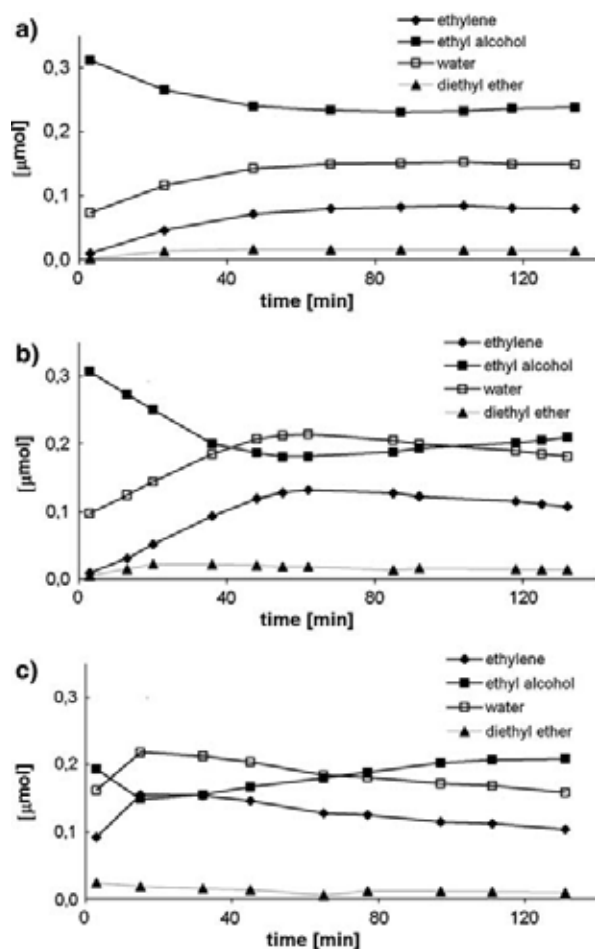
(prof. Adam Bielański, dr Tomasz Kasza)

Sól srebrowa heteropolikwasu $H_6P_2W_{18}O_{62}$ została otrzymana przez zobojętnienie wodnego roztworu heteropolikwasu stechiometryczną ilością Ag_2CO_3 . Sól poddawano redukcji *in situ* w przepływowym reaktorze katalitycznym działaniem par etanolu nasyconych w temperaturze pokojowej podawanych w strumieniu helu. Przebieg aktywacji katalizatora śledzono badając stężenie produktów konwersji etanolu. Przedstawia to rysunek. Konwersję etanolu ustaloną po upływie 2h przyjmowano za charakterystyczną dla katalizatora aktywowanego w danej temperaturze. Nie obserwowano żadnej aktywności (a więc brak reakcji) katalizatora aktywowanego w $190^\circ C$. Była ona natomiast wyraźna po aktywacji w $210^\circ C$ i wzrastała aż do temperatury $290^\circ C$. Produktami typowymi dla reakcji kwasowo-zasadowych były etylen, woda oraz

eter etylowy. Produkt odwodornienia typowy dla procesów redox, aldehyd octowy, pojawił się tylko w bardzo małych ilościach. Aldehyd octowy, produkt utleniający dehydrogenacji, pojawił się obok produktów dehydratacji, po użyciu powietrza jako gazu nośnego.

Stan zredukowania katalizatora określano badając widma XPS, które zmieniały się zależnie od temperatury i czasu redukcji. Wskazywały one na wzrastającą zawartość srebra Ag^0 i malejącą zawartość srebra Ag^+ w miarę podwyższania temperatury redukcji. Badania rozkładu pierwiastków w mikroskopie skaningowym wykazały obecność skupień srebra Ag^0 o rozmiarach 2-5 μm rozsianych na krystalitach o dużych rozmiarach, identyfikowanych jako krystality $H_6P_2W_{18}O_{62}$.

Obecność anionów kwasu $H_6P_2W_{18}O_{62}$ potwierdziło badanie widm IR.



Rys. 1. Przebieg testów katalitycznych na soli srebrowej zredukowanej w temperaturach: a) $230^\circ C$, b) $250^\circ C$, c) $270^\circ C$.

1.9. Synteza nanostrukturalnych katalizatorów typu mieszanych tlenków o właściwościach zasadowych

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

Syntetyczne minerały warstwowe typu hydrotalkitu, o wzorze ogólnym $[M^{2+}_{1-x}M^{3+}_x(OH)_2]A^{n-}_{x/n}$, gdzie M^{2+} i M^{3+} to kationy metali w warstwie, a A^{n-} kompensujące ładunek warstwy aniony międzywarstwowe, uznawane są obecnie za jedne z najbardziej obiecujących prekursorów mieszanych układów tlenkowych do zastosowań katalitycznych. Dzieje się tak ze względu na dużą powierzchnię właściwą tlenków otrzymanych przez kalcynację oraz homogeniczną (na poziomie atomowym) dystrybucję pierwiastków metalicznych. Mieszane tlenki zawierające w swoim składzie pierwiastki o właściwościach zasadowych syntetyzowano pod kątem aplikacji w reakcji transestryfikacji oleju rycynowego.

Otrzymano serię preparatów typu hydrotalkitu o stosunku atomowym M^{2+}/M^{3+} wynoszącym odpowiednio 2 i 3. Jako pierwiastków metalicznych użyto: $M^{2+} = Mg$ lub Zn oraz $M^{3+} = Al$. Jako aniony kompensujące wykorzystano aniony węglanowe. Próbkę otrzymywano metodą współstrącania z wodnych roztworów soli azotanowych Mg , Zn i Al , przez wkraplanie do wodnego roztworu węglanu sodowego, w temperaturze $55^\circ C$, przy pH wynoszącym 10. Otrzymane osady po odmyciu i wysuszeniu w przepływie powietrza w temperaturze $50^\circ C$ oznaczono odpowiednio jako Mg_2AlCO_3 , $MgZnAlCO_3$, Mg_3AlCO_3 , $Mg_{1,5}Zn_{1,5}AlCO_3$ (stosunek liczb przy symbolach pierwiastków metalicznych odpowiada stosunkowi atomowemu metali w produkcie). Wszystkie preparaty posiadają charakterystyczną strukturę węglanowych form związków typu hydrotalkitu (XRD), a stosunki atomowe pierwiastków metalicznych są bliskie zamierzonym (analiza chemiczna ICP OES). Badania ewolucji termicznej otrzymanych preparatów w wysokotemperaturowej kamerze XRD pozwoliły na stwierdzenie, iż preparaty zawierające cynk są znacznie mniej stabilne termicznie: w preparatach serii $Mg-Al$ struktura warstwowa jest dobrze zachowana jeszcze po kalcynacji w temperaturze $300^\circ C$, natomiast w preparatach z cynkiem już kalcynacja w temperaturze $200^\circ C$ powoduje praktycznie zanik struktury warstwowej. Efekt ten jest związany ze znacznie niższą stabilnością termiczną wodorotlenku cynku – czysty związek rozkłada się w temperaturze $125^\circ C$, w porównaniu do temperatury rozkładu czystego wodorotlenku magnezu, która wynosi $350^\circ C$. Badania rozkładu próbek metodą analizy gazów resztkowych (RGA, EGA) w zakresie $40-650^\circ C$ potwierdziły wyniki badań XRD – ewolucja wody międzywarstwowej i strukturalnej zachodzi dla preparatów $Mg-Al$ w temperaturach 210 oraz $410^\circ C$. Finalny rozkład międzywarstwowych anionów – głównie węglanowych i resztkowych azotanowych (wprowadzonych z soli azotanowych) zachodzi dla próbek $Mg-Al$ w temperaturach $420-430^\circ C$. Natomiast wyniki dla preparatów serii $Mg-Zn-Al$, pokazują, że obecność cynku powoduje pojawienie się dodatkowych efektów, związanych z obniżeniem temperatury dehydratacji/dehydroksylacji - odpowiednie maksima widoczne są w temp. 170 oraz $290^\circ C$. Dla próbek $Mg-Zn-Al$ charakterystyczne jest także dodatkowe maksimum emisji CO_2 powyżej $600^\circ C$, przypisywane rozkładowi powstających wcześniej węglanów lub uwalnianiu CO_2 zaokludowanego produktach kalcynacji. W celu uzyskania materiałów do testów katalitycznych prekursorzy hydrotalkitowe kalcynowano przez 3 h w temperaturze $450^\circ C$. Otrzymane metodą BET wartości powierzchni właściwej wynosiły odpowiednio: Mg_2AlCO_3 – $168\text{ m}^2/g$, $MgZnAlCO_3$ – $104\text{ m}^2/g$, Mg_3AlCO_3 - $189\text{ m}^2/g$, $Mg_{1,5}Zn_{1,5}AlCO_3$ - $115\text{ m}^2/g$. W materiałach otrzymanych w wyniku kalcynacji w $450^\circ C$ analiza fazowa diagramów XRD pozwoliła na zidentyfikowanie jedynie faz słabo krystalicznych tlenków: MgO dla próbek układu $Mg-Al$, a ZnO - w preparatach $Mg-Zn-Al$. W przypadku tych ostatnich brak refleksów pochodzących od tlenku MgO pokazuje, że w obecności cynku jego krystalizacja jest wyraźnie utrudniona.

2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

2.1. Proces transestryfikacji oleju rycynowego oraz synteza katalizatorów

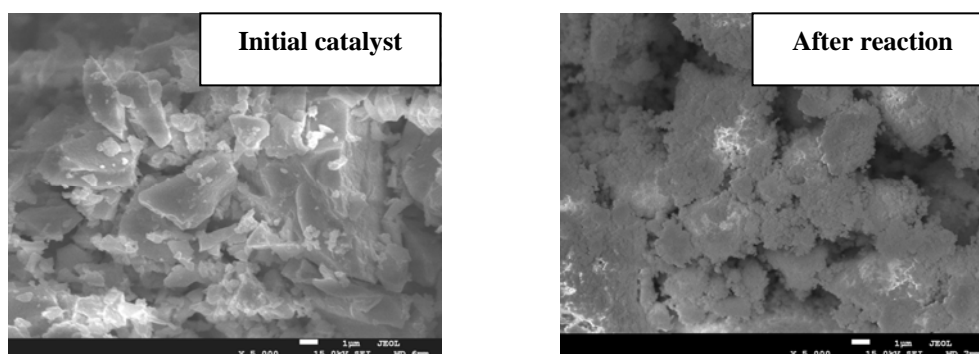
(doc. Alicja Drelinkiewicz, dr Tomasz Kasza, mgr Adam Zięba, prof. Adam Bielański, mgr Leszek Matachowski)

Badania te są kontynuacją już rozpoczętych prac nad reakcją transestryfikacji triglicerydów wyższych kwasów tłuszczowych metanolem, procesu, który jest podstawową reakcją w wytwarzaniu biopaliwa, biodiesla.

Reakcję transestryfikacji oleju rycynowego metanolem prowadzono w temperaturze 60°C pod ciśnieniem atmosferycznym przy stosunku molowym CH₃OH:olej=29:1. W badaniach metanolizy oleju rycynowego zastosowano katalizatory kwasowe bazujące na heteropolikwasach typu Keggina (HPW). Serię I stanowiły katalizatory nośnikowe, zawierające 37.5 wt% H₄SiW₁₂O₄₀, który osadzono na żelu ZrO₂ metodą impregnacji. Katalizatory te prażone były w temperaturach 175-500°C. Seria II to sole potasowe i ceszowe kwasu H₃PW₁₂O₄₀ o stopniu wymiany x=2, 2.5 i 3 (M_xH_{3-x}PW₁₂O₄₀).

Katalizatory serii I, HPW/ZrO₂. W toku badań przeprowadzonych uprzednio dla katalizatorów HPW/ZrO₂ suszonych w 105°C stwierdzono, że HPW jako dobrze rozpuszczalny w metanolu jest częściowo usuwany w trakcie reakcji metanolizy z nośnika-ZrO₂ i działa jako katalizator homogeniczny. W celu uzyskania katalizatorów zawierających HPW związany chemicznie z nośnikiem, katalizatory prażone były w temperaturach 175-500°C. Stwierdzono, że katalizator prażony w temp. 500°C był w stosowanych warunkach metanolizy nieaktywny. Prażenie w temperaturach pośrednich wpływało korzystnie na wiązanie HPW z nośnikiem. Pozwala to sądzić że istnieje optymalna temperatura prażenia, zastosowanie której, umożliwi uzyskanie preparatów HPW/ZrO₂ działających jako katalizatory heterogeniczne.

Katalizatory serii II, sole Cs-HPW i K-HPW otrzymano przez wytrącenie roztworami Cs₂CO₃, CsCl oraz K₂CO₃, co dało preparaty różniące się zasadniczo powierzchnią właściwą. W badaniach stosowano sole świeżo przygotowane traktowane w różnych temperaturach, jak i preparaty starzone (3 miesiące). Katalizatory przed jak i po reakcji metanolizy badano metodą SEM (EDS). Obserwowano, że aktywność soli K i Cs malała ze wzrostem stopnia wymiany protonów w HPW i aktywność soli K-HPW była wyższa od analogicznych soli Cs-HPW. Najwyższą aktywność uzyskano dla soli K₂-HPW. Nie obserwowano natomiast korelacji aktywności z powierzchnią właściwą soli. Efekt ten wiązano z faktem, że jak pokazały badania SEM dla katalizatorów po reakcji, sole Cs i K były w trakcie metanolizy w formie cząstek koloidalnych, tworzonych w kontakcie z mieszaniną reakcyjną. Metodą dyfrakcji laserowej stwierdzono, że wielkość tych cząstek zależała od rodzaju soli jak i metody ich przygotowania, suszenia, starzenia. Najmniejsze cząstki obecne były dla soli K₂-HPW wynikiem czego, była najwyższa aktywność tej soli.



Obraz mikroskopowy Cs₂-HPW przed i po reakcji metanolizy oleju rycynowego

2.2. Katalityczne utlenianie sadzy samochodowej

(prof. Jerzy Haber, dr Tadeusz Machej, mgr Wojciech Rojek)

Gazy spalinowe z silników Diesla, nawet najbardziej nowoczesnych, zawierają tlenki azotu NO_x i sadzę, których emisja musi zostać ograniczona z powodu ich szkodliwego wpływu na zdrowie ludzi i środowisko naturalne.

Obowiązujące w krajach Unii Europejskiej normy emisji spalin są coraz surowsze. W roku 2008 wejdzie w życie norma Euro 5, zgodnie z którą emisja sadzy z samochodów osobowych z silnikami diesla musi zostać zmniejszona pięciokrotnie w porównaniu z wprowadzoną w 2005 roku normą Euro 4, tj. z 0,025 do 0,005 g/km.

Zastosowanie katalizatorów do utleniania cząstek sadzy może być skutecznym sposobem ich usuwania. Katalizator powinien znacznie obniżyć temperaturę procesu – najkorzystniej do poziomu 300-350°C, tj. temperatury spalin.

Przeprowadzono wstępną ocenę aktywności próbek katalizatorów złożonych z tlenku wanadu i potasu w reakcji utleniania sadzy, stosując metodę analizy termicznej (TG-DTA). Jako katalizatorów użyto spreparowanych w tym celu próbek V_2O_5 , KV-3 ($\text{K}_2\text{O}\cdot 3\text{V}_2\text{O}_5$), KV-4 ($\text{K}_2\text{O}\cdot 4\text{V}_2\text{O}_5$) oraz KV-5 ($\text{K}_2\text{O}\cdot 5\text{V}_2\text{O}_5$), które mieszano z sadzą syntetyczną Printex U (Degussa), przypominającą sadzę z silników Diesla.

Na podstawie przeprowadzonych badań stwierdzono, że ich stosowanie obniża znacznie temperaturę utleniania sadzy. Wartości temperatur, w której proces ten biegnie z największą szybkością dla badanych katalizatorów mieściły się w granicach 370-385 °C.

Obniżenie temperatury utleniania jest efektem pożądanym, chodzi jednak o to, aby szybkość utleniania sadzy była wyższa od szybkości jej powstawania w silniku. Określenie szybkości utleniania przeprowadzono w reaktorze przepływowym w warunkach izotermicznych (350°C) przy natężeniu przepływu gazu reakcyjnego (o zawartości tlenu ok. 10 %) równym 130 dm³/h. Przebieg reakcji katalitycznej rejestrowano, mierząc stężenie dwutlenku węgla w funkcji czasu.

W Tabeli 1 przedstawiono szybkość początkową utleniania sadzy na różnych katalizatorach. Szybkość porównano z szybkością powstawania sadzy w silniku diesla [Kašpar J., Fornasiero P., Hickey N., Catal. Today, 77 (2003) 419] wynoszącą 4 mg/m³·s dla warunków podanych w tabeli. Widać, że tylko w obecności katalizatora KV-3 sadza usuwana jest na bieżąco z gazów spalinowych.

Tabela 1. Szybkość początkowa utleniania sadzy na badanych katalizatorach

Katalizator	Szybkość początkowa utleniania sadzy [mg/m ³ ·s]
V_2O_5	2,7
KV-5	2,45
KV-4	2,7
KV-3	12,0

Szybkość powstawania sadzy w silniku diesla=4 mg/m³·s; silnik 2 l, 2000 obr/min

2.3. Reakcja epoksydacji olefin tlenem molekularnym w obecności koreduktora - badanie właściwości katalitycznych heteropolizwiązków

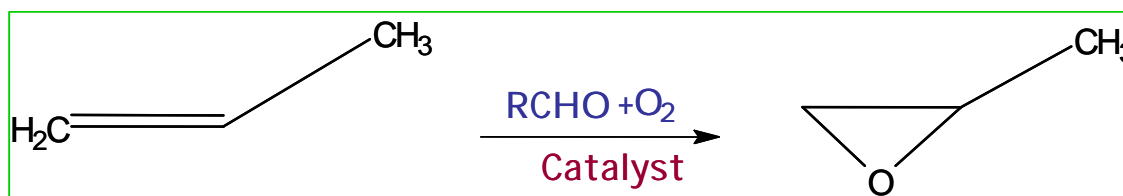
(dr Katarzyna Pamin, prof. Jerzy Haber)

Epoksydacja olefin jest reakcją o dużym znaczeniu dla syntezy organicznej, podczas której atom tlenu jest dodawany do wiązania podwójnego węgiel – węgiel. Epoksydy są ważnymi związkami, wykorzystywanymi do otrzymywania produktów pożądaných. Tlenek propylenu jako ważny półprodukt przemysłowy znajduje się w grupie 50 najważniejszych związków chemicznych produkowanych produkowanych światem. Zapotrzebowanie na tlenek propylenu stale wzrasta wraz z jego ceną. Obecnie stosowane technologie charakteryzują się stosunkowo niskimi wydajnościami do tlenu propylenu i obecnością produktów niepożądanych. Zaostrzające się przepisy ochrony środowiska stanowią dodatkowy bodziec do poszukiwania nowych, tanich i bezodpadowych technologii wytwarzania użytecznych produktów.

Heteropolikwasy są związkami o mocnych właściwościach kwasowych i redoksoowych. Można je modyfikować przez wprowadzenie kationów metali przejściowych przejściowych celu otrzymania efektywnych katalizatorów reakcji utleniania. Epoksydacja propylenu w łagodnych warunkach z tlenem cząsteczkowym i aldehydem jako ko-reduktorem i z metaloporfirynami jako katalizatorami była badana w naszym Instytucie przez wiele lat. Jednakże metaloporfiryny są stosunkowo drogie ze względu na niską wydajność syntezy, które ulegają utleniającej degradacji.

Przedmiotem badań była synteza serii soli kobaltowych kwasu fosfowolframowego (HPW) i fosfomolibdenowego (HPMo): $H_2CO_{0.5}PM_{12}O_{40}$, $HCoPM_{12}O_{40}$ i $CO_3(PM_{12}O_{40})_2$, gdzie M=Mo lub W i heteropoli- związków modyfikowanych kationami metali przejściowych $(n-Bu_4N)_4HPMo_{11}M(L)O_{39}$, gdzie L jest ligandem, M=Co lub Mn, oraz badanie ich aktywności katalitycznej w reakcji epoksydacji propylenu. Dla porównania w reakcji epoksydacji zbadano aktywność katalityczną HPW, HPMo i $(n-Bu_4N)_4H_3PMo_{11}O_{39}$.

Katalizatory były charakteryzowane za pomocą analizy termicznej, dyfraktometrii rentgenowskiej, spektroskopii w podczerwieni i UV-Vis. Epoksydacja propylenu była prowadzona w temperaturze pokojowej z tlenem cząsteczkowym i w obecności aldehydu propionowego jako ko-reduktora.



Rys. 1. Epoksydacja propylenu

Głównym produktem reakcji był tlenek propylenu. Wszystkie katalizatory były aktywne w badanej reakcji. Otrzymano następujący szereg aktywności katalitycznej:



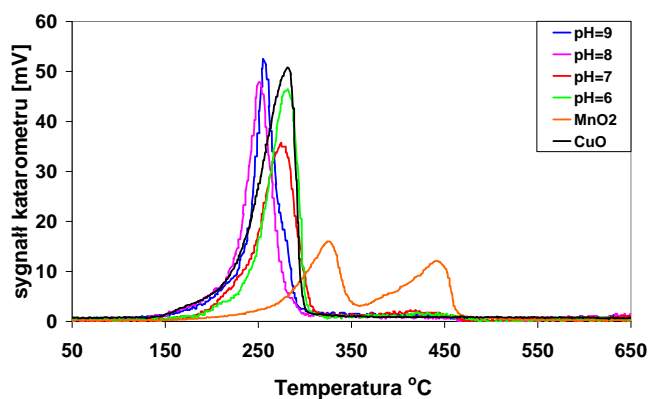
Różnice w aktywnościach katalitycznych są prawdopodobnie związane z rozpuszczalnością katalizatorów. HPMo jest nierozpuszczalny w warunkach reakcji. Wprowadzenie czynnika zmian fazowych znacznie poprawia rozpuszczalność soli fosfomolibdenowych w środowisku reakcji, co wpływa na poprawę ich aktywności katalitycznej. Wprowadzenie kationów kobaltu i manganu do struktury Keggina powoduje powstanie nowych centrów aktywnych, które znacznie wpływają na aktywność katalityczną. Wszystkie badane katalizatory mogą być odzyskiwane i powtórnie użyte praktycznie bez zmiany aktywności katalitycznej.

2.4. Badanie procesu redukcji w układzie Cu-Mn-Zn-O

(doc. Ryszard Grabowski, prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Małgorzata Zimowska,,
mgr inż. Jan Mizera, mgr Justyna Plona)

Tlenki miedzi i manganu są częstymi składnikami katalizatorów typu mieszanych tlenków, wykorzystywanych w reakcjach całkowitego utleniania. W procesach tego typu ważnym parametrem charakteryzującym katalizator jest jego redukowalność. Zarówno skład chemiczny prekursora, jak i warunki prowadzenia syntezy, w istotny sposób wpływają na właściwości fizykochemiczne układów tlenkowych otrzymanych w wyniku rozkładu termicznego. Prezentowane badania miały na celu otrzymanie mieszanych tlenków Cu-Mn-Zn-O oraz określenie ich redukowalności w zależności od warunków syntezy prekursora. Jako sposób syntezy wybrano metodę współstrącania przy stałym pH, stosowaną w preparatyce związków typu hydrotalkitu. Zmiennym parametrem była wartość pH strącania, którą ustalano w zakresie 6-9. Prekursory Cu-Mn-Zn o stosunku atomowym wynoszącym odpowiednio 5:3:1 współstrącano z rozcieńczonych, wodnych roztworów azotanów miedzi, manganu i cynku roztworem Na_2CO_3 , w temperaturze 50°C . Analiza chemiczna wykazała, że wraz ze wzrostem pH syntezy rosła ilość manganu w strąconym osadzie, przy czym dla $\text{pH} \geq 8$ stosunek atomowy pierwiastków metalicznych w otrzymanych próbkach był bliski zamierzonemu. Metoda XRD pokazała, że zsyntetyzowane materiały posiadają strukturę warstwową. W próbce otrzymanej przy $\text{pH} = 6$ obserwowano wyłącznie dobrze wykrystalizowany hydroksyazotan miedzi(II) $\text{Cu}_2(\text{OH})_3\text{NO}_3$. W przypadku preparatu otrzymanego przy $\text{pH} = 7$ fazą towarzyszącą był mieszany hydroksywęglan miedziowo-cynkowy $(\text{Cu,Zn})_2\text{CO}_3(\text{OH})_2$, który w prekursorach zsyntetyzowanych przy $\text{pH} \geq 8$ stanowił jedyną zidentyfikowaną fazę krystaliczną. Główną fazą otrzymaną w wyniku kalcynacji prekursorów w 400°C był tlenek miedzi(II). Jego krystaliczność malała w miarę wzrostu pH syntezy prekursora. W preparatach otrzymanych z prekursorów strąconych przy $\text{pH} > 6$, obserwowano dodatkowo słabe refleksy wskazujące na krystalizację spinelu CuMn_2O_4 . Nie identyfikowano żadnej osobnej fazy krystalicznej zawierającej cynk, który najprawdopodobniej wchodzi jako domieszka w skład spinelu. Efekty obserwowane w eksperymentach termoprogramowanej redukcji układu u-Mn-Zn-O wodorem w zakresie temperatur $50\text{-}650^\circ\text{C}$ związane są z redukcją Cu(II) do Cu(0), oraz Mn(IV) do Mn(II). Najlepszą

redukowalność, a tym samym najniższą temperaturę redukcji (252°C i 258°C) wykazywały próbki otrzymane przy pH równym odpowiednio 8 i 9, w których współistniały słabo krystaliczny CuO oraz słabo krystaliczny spinel. Przesunięcie maksimum efektu w stronę wyższych temperatur dla układów otrzymanych z prekursorów strąconych przy niższych pH (279°C dla pH 7 i 282°C dla pH 6) odzwierciedla



względnie trudniejszą redukcję lepiej wykrystalizowanego CuO. Należy podkreślić, że w badanych układach obserwuje się w zasadzie jedno maksimum konsumpcji wodoru, chociaż redukcja czystego CuO i czystego MnO_2 otrzymanych w drodze analogicznej preparatyki zachodzi w różnych temperaturach i w sposób bardziej złożony - dla CuO jest to 282°C , a dla MnO_2 obserwuje się dwa maksima, przy 382°C i 445°C . Występowanie w układzie Cu-Mn-Zn-O tylko jednego maksimum, oraz jego przesunięcie w kierunku niższych temperatur świadczy o istnieniu silnego efektu synergetycznego.

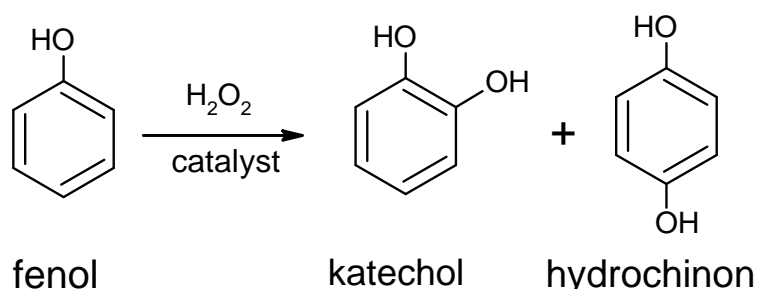
2.5. Katalityczne usuwanie związków allochtonicznych z zastosowaniem salenowych kompleksów metali przejściowych

(prof. Jerzy Haber, dr Jan Poltowicz)

Utlenianie związków będących zanieczyszczeniami środowiska naturalnego przy użyciu ekologicznych utleniaczy takich jak tlen molekularny lub woda utleniona jest obszarem badań budzącym duże zainteresowanie w ostatnich latach. Fenole należą do zanieczyszczeń najczęściej występujących w środowisku naturalnym. Potrzebny jest wydajny proces do przetwarzania fenoli w związki biodegradowalne. Wśród makrocyklicznych kompleksów czterokleszczowe zasady Schiffa (katalizatory Jacobsena) są znane jako doskonałe katalizatory procesów utleniania związków organicznych. W tej pracy zastosowano różne zasady Schiffa jako związki modelowe dla cytochromu P-450 w procesie utleniania fenoli wodą H_2O_2 jako czynnikiem utleniającym.

Ligandy salenowe otrzymano w stechiometrycznej reakcji odpowiedniego aldehydu salicylowego i dwuetyloaminy w 96% etanolu. Reakcję metalacji ligandu salenowego wykonano klasyczną metodą znaną z literatury za pomocą octanu mangan(II). Katalizatory Mn(III)salenOAc były otrzymane z kompleksów salenowych Mn(II)salen według metody Jacobsena i współprac. Otrzymane katalizatory scharakteryzowano różnymi metodami spektroskopowymi takimi jak FT-IR, UV-Vis, NMR, EPR oraz cykliczną voltametrię.

Zbadano aktywność katalityczną dwóch serii katalizatorów: Mn(II)salenX_2 i $\text{Mn(III)salenX}_2\text{OAc}$, gdzie $\text{X}=\text{H}$, OCH_3 , C_6H_5 , OH , $\text{Mn(II)salen(t-Bu)}_4$ i $\text{Mn(III)salen(t-Bu)}_4\text{OAc}$ w procesie utleniania fenolu wodą utlenioną. Głównymi produktami reakcji są katechol i hydrochinon (Rys. 1). Wszystkie kompleksy były aktywne w badanej reakcji.



Rys 1. Struktura badanych salenowych metalokompleksów (gdzie $\text{M} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$)

Dla kompleksów salenowych Mn(II)salenX_2 otrzymano następujący szereg aktywności:



Jest to zgodne z elektrono-donorowymi własnościami podstawników. Obecność podstawników w makrocyklicznym pierścieniu salenowym ma również wpływ na selektywność reakcji. Charakter elektrono-donorowy podstawników wzrasta w następującym szeregu:



i w ten sposób wzrasta też selektywność do hydrochinonu. Wśród kompleksów Mn(II)salenX_2 najbardziej aktywny jest Mn(II)salen(OH)_2 . Wszystkie kompleksy Mn(III)salenX_2 są bardziej aktywne niż ich analogi Mn(II)salenX_2 . Największą aktywność wśród wszystkich badanych katalizatorów wykazywał kompleks Mn(III)salenOAc . Obecność aksjalnego ligandu i podstawników powoduje znaczny wzrost wydajności do hydrochinonu. Na bazie otrzymanych rezultatów zaproponowano mechanizm reakcji utleniania fenolu.

2.6. Wybrane reakcje węglowodorów z grupy monoterpenu na materiałach mikro- i mezoporowatych

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

Do klasy terpenów należy cały szereg węglowodorów o urozmaiconej budowie, poczynając od mono-, poprzez seskwi-, bi-, tri- i tetra-terpeny, a kończąc na politerpenach. Są one ważnym źródłem półproduktów pochodzenia naturalnego dla przemysłu spożywczego, farmaceutycznego, perfumeryjnego i chemicznego. Jest to istotne, biorąc pod uwagę wzrost znaczenia naturalnych, odnawialnych zasobów surowcowych i wykorzystywanych przez nie technologii, często typu *green chemistry*. Otrzymanie tego typu substancji w oparciu o ropę naftową czy węgiel kamienny, jakkolwiek teoretycznie możliwe, byłoby z pewnością wieloetapowe i nieoptyczne. Nasze prace zogniskowały się przede wszystkim na badaniach procesów izomeryzacji i utleniania prowadzonych w fazie ciekłej.

Jednym z powszechnie występujących węglowodorów monoterpenu jest α -pinen, związek wyjściowy do syntezy całej gamy półproduktów, z których najważniejsze są kamfen, limonen i *p*-cymen. Reakcja izomeryzacji α -pinenu jest ważnym procesem przemysłowym, prowadzonym na uwodnionym ditlenku tytanu, zmodyfikowanym kwasem siarkowym. Katalizator ten wykazuje jednakże niską aktywność i powoduje korozję instalacji, dlatego celowe jest zastąpienie go innym, bardziej wydajnym kontaktem. Izomeryzację α -pinenu badano na modyfikowanych katalizatorach mikro- i mezoporowatych. Jako katalizatorów użyto zeolitów typu ZSM-5 i MCM-22. W odpowiednio dobranych warunkach hydrotermalnych zmodyfikowano te materiały, w celu wprowadzenia mezoporów do kryształów zeolitów. Przykładowo, zeolit ZSM-5 zmodyfikowany przy użyciu stosunkowo stężonych roztworów NaOH wykazał 3-4 krotny wzrost konwersji dla reakcji prowadzonej w temperaturze 90°C.

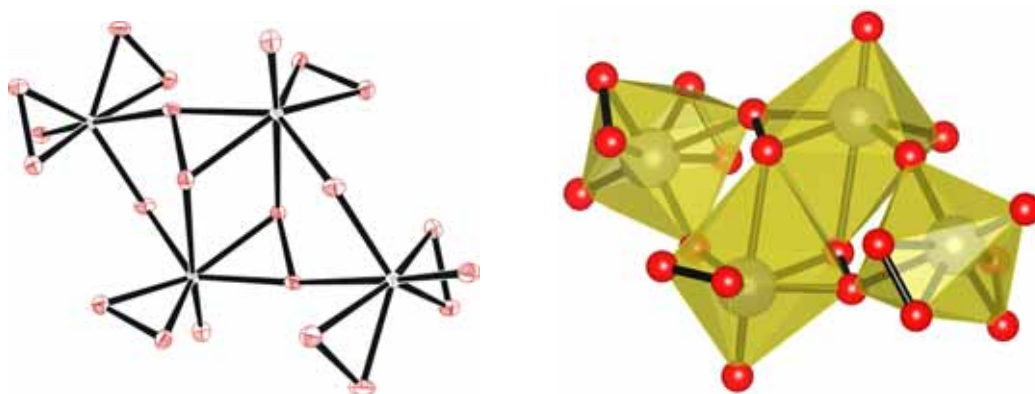
Drugim badanym procesem było utlenianie norbornenu do epoksynorbornanu. Epoksynorbornan znajduje zastosowanie m.in. w produkcji polimerów specjalnych i półproduktów dla przemysłu farmaceutycznego. Jako utleniaczy użyto nadtlenu wodoru i TBPH. Proces badano zarówno w obecności czystego kwasu molibdenofosforowego zawierającego wanad (HPMoV), jak i heteropolikwasu osadzonego na nośnikach o różnej strukturze: SBA-3, SBA-15, ferrierycie i ITQ-2. Wykazano, że proces utleniania norbornenu zależy od nośnika i jego struktury. Aktywność heteropolikwasu osadzonego na materiałach mezoporowatych była najwyższa. Wysoką wydajność uzyskano stosując w roli utleniacza TBPH.

Podjęto też syntezy materiałów hybrydowych, łączących cechy klasycznych zeolitów i mezoporowatych sit molekularnych o strukturze MCM-41. Materiały te zbadano w reakcji izomeryzacji α -pinenu. W celu pełniejszego określenia właściwości otrzymanych katalizatorów hybrydowych typu ZSM-5/MCM-41, oraz wykorzystując naszą wcześniejszą znajomość procesów transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych, wykonano ponadto badania procesu izomeryzacji *m*-ksylenu w fazie gazowej. Wykonano charakterystykę fizykochemiczną otrzymanych katalizatorów (XRD, sorpcja azotu, NMR, SEM i XPS).

2.7. Stałe superkwasy oraz nowe perokso-związki Mo(VI), W(VI) i V(V), synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne

(prof. Wiesław Łasocha, dr Maciej Grzywa)

W ramach zadania uzyskano nowe nieorganiczne połączenia nadtlenowe, tj. $\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{WO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}\cdot\text{H}_2\text{O}$, $\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}\cdot\text{H}_2\text{O}$ i $\text{Cs}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{O}]_2\}$. Rozwiązano struktury krystaliczne otrzymanych związków metodami: monokrystalicznymi ($\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{WO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}\cdot\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cs}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{O}]_2\}$) oraz proszkowymi ($\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}\cdot\text{H}_2\text{O}$). Wszystkie wymienione związki krystalizują w układzie trójskośnym, w grupie przestrzennej P-1(2). Sole rubidowe są izostrukuralne. Z kolei sól ceszowa okazała się być pierwszym typem związku nadtlenowego, w którym centralny atom molibdenu nie koordynuje atomu tlenu cząsteczki wody, lecz uwzględniając słabe wiązania 2.401(6), 2.565(6) Å, koordynuje atom tlenu grupy nadtlenowej, czyniąc strukturę czterojądrową (Rys. 1). Wyznaczono zawartość grup nadtlenowych metodą manganometryczną, ponadto pomiary IR badanych kompleksów potwierdziły obecność ugrupowań perokso. Wykonano pomiary TG/DSC w celu określenia trwałości badanych związków oraz ścieżki rozkładu wraz ze wzrastającą temperaturą. Związki typu dwujądrowego wykazują większą stabilność niż związki typu tetraperoxo. Kompleksy rubidowe są stabilne do temp. 90°C, a następnie rozkładają się wybuchowo. Większą trwałość obserwuje się w przypadku soli ceszowej, trwałej do temp. 110°C i rozkładającej się do $\text{Cs}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ bez efektu eksplozji.



Rys. 1. Budowa anionu $\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{O}]_2\}^{2-}$ w związku $\text{Cs}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{O}]_2\}$.

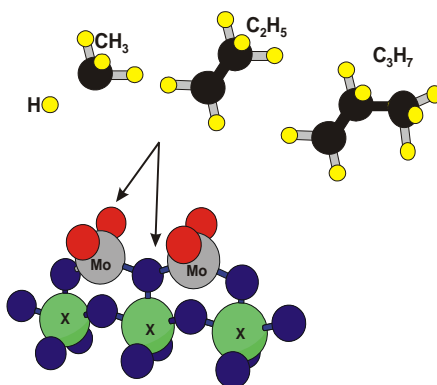
3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy

3.1. Wpływ domieszki i nośnika na procesy adsorpcji małych cząsteczek na katalizatorach molibdenowych – badania kwantowo-chemiczne

(dr Renata Tokarz-Sobieraj, prof. Małgorzata Witko)

Właściwości katalityczne układów molibdenowych zależą ściśle od właściwości kwasowo-zasadowych powierzchni katalizatora, które z jednej strony decydują o sile i charakterze oddziaływania powierzchni-substrat, z drugiej ułatwiają desorpcję produktu z powierzchni. Dane eksperymentalne pokazują, że właściwości katalityczne układów tlenkowych można modyfikować poprzez domieszkowanie katalizatora lub umieszczenia go na określonym nośniku.

Celem przedstawianej pracy były teoretyczne badania struktury elektronowej układów Mo-O z dodatkiem jonów domieszek bądź osadzonych na nośnikach o różnorodnym kwasowo-zasadowym charakterze. Katalityczny układ Mo-O modelowany był w obliczeniach małym klasterem Mo_2O_7 osadzonym na klasterze X_3O_{10} (gdzie X = Mg, Al, Ti, Cr, Ni, Mn, V) opisującym nośnik/domieszkę (Rys.1). Zbadano oddziaływanie modelowego układu z rodnikami węglowodorowymi ($\text{CH}_3\cdot$, $\text{C}_2\text{H}_5\cdot$, $\text{C}_3\text{H}_7\cdot$) i rodnikiem wodorowym ($\text{H}\cdot$). Obliczenia wykonano metodą ab-initio DFT, w przybliżeniu nielokalnym (GGA-RPBE).



Rys.1. Klaster $\text{Mo}_2\text{O}_7/\text{X}_3\text{O}_{10}$ (X = Mg, Al, Ti, Cr, Ni, Mn, V) modelujący układy molibdenowe z domieszką lub na nośniku

Wyniki analizy populacyjnej pokazują, że wprowadzenie dodatkowego (obok Mo) jonu metalu powoduje bardzo nieznaczną fluktuację ładunku na tlenach molibdenylowych i niewielkie obniżenie nukleofilowości centrów mostkowych (skoordynowanych do dwóch atomów Mo i jonu domieszki/nośnika). Dodatkowe jony metaliczne tworzą centra kwasowe słabsze niż jony Mo, powodując jednocześnie zmiany w ładunku Mo (obniżenie w przypadku Mg, Al i Ti bądź wzrost w układach z udziałem Cr, Ni, Mn, V).

Jako wynik oddziaływania rodników $\text{CH}_3\cdot$, $\text{C}_2\text{H}_5\cdot$, $\text{C}_3\text{H}_7\cdot$ z systemami Mo-O-X obserwuje się zarówno rodniki alkoksylowe zaadsorbowane na powierzchni (np. $\text{CH}_3\text{-O}$ w układzie Mo-O-Cr), produkty kolejnych aktywacji rodników (np. $\text{CH}_2\text{-O}$ w układzie Mo-O-Ti), ale również działanie odpychające (np. C_2H_5 w kontakcie z Mo-O-Ni).

Przeprowadzone obliczenia wskazują, że zmiany struktury elektronowej pod wpływem domieszek/nośnika mają charakter lokalny. Obecność dodatkowego jonu metalu powoduje zmianę nukleofilowości/reaktywności centrów tlenowych (Mo=O i Mo-O-X) i kwasowości jonów metali, co z kolei wpływa na charakter produktów powstałych w układzie. Obliczenia pokazały, że wprowadzenie domieszki czy umieszczenie układu molibdenowego na nośnikach może modyfikować jego właściwości kwasowo-zasadowe.

3.2. Kwantowo-chemiczne badania nad mechanizmem utleniania allilowego cykloheksenu na porfirynie manganu(III)

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

Celem projektu było określenie ścieżek reakcji i znalezienie produktów przejściowych reakcji utleniania allilowego cykloheksenu katalizowanej przez porfiryny manganu(III). Badania przeprowadzono kwantowo-chemiczną metodą ab initio DFT zaimplementowaną w programie StoBe, zarówno w przybliżeniu lokalnym (LDA-VWN), jak i nielokalnym (GGA-RPBE). Struktury badanych układów charakteryzowano za pomocą energii, długości i rzędów wiązań (analiza populacyjna Mayera) oraz ładunków atomowych (analiza populacyjna Mullikena).

Z danych eksperymentalnych wynika, że kompleksem aktywnym w badanej reakcji jest tzw. okso-kompleks porfiryny manganowej. Dlatego też do obliczeń użyto modelu, w skład którego wchodził izolowany kompleks $[Mn(P)ClO]$ (gdzie P = ligand porfirynowy) oraz cząsteczka cykloheksenu.

Analiza wyników badań doświadczalnych dowodzi, że reakcja utleniania allilowego jest reakcją rodnikową, której pierwszym etapem jest oderwanie atomu wodoru od cząsteczki substratu i przyłączenie go do cząsteczki porfiryny. W obrębie kompleksu porfirynowego istnieje kilka miejsc wiązania atomu wodoru; są nimi oba ligandy aksjalne (tlen grupy okso i jon chlorkowy), oraz wiązania podwójne pierścienia tetrapirolowego. Tej ostatniej możliwości nie rozważano w dalszych badaniach, ponieważ prowadzi ona do zniszczenia struktury samego katalizatora. Wyniki obliczeń pokazują, że przyłączenie atomu wodoru do tlenu grupy okso prowadzi do utworzenia grupy OH związanej wiązaniem pojedynczym z jodem metalu. Nie obserwuje się zmian parametrów wiązania aksjalnego. Addycja atomu wodoru do liganda chlorkowego prowadzi do utworzenia elektrycznej obojętnej cząsteczki HCl, która oddysocjuje od badanego kompleksu. Ani długość, ani rząd wiązania mangan-tlen nie ulegają znaczącym zmianom. Porównanie wartości energii całkowitej obu układów pokazuje, że wiązanie wodoru przez tlen grupy okso jest uprzywilejowane energetycznie o 36.4 kJ/mol. Niemniej, wiązanie wodoru przez ligand chlorkowy prowadzi do powstania wolnej pozycji koordynacyjnej, co może mieć duże znaczenie dla przebiegu reakcji katalitycznej w fazie ciekłej.

W kolejnym kroku zbadano oddziaływanie cykloheksenu z katalizatorem. Wyniki przeprowadzonych obliczeń pokazują, że substrat zostaje fizysorbowany w odległości 2.18Å od grupy okso porfiryny. Rozważono dwa alternatywne scenariusze reakcji prowadzącej do utworzenia alkoholu. W pierwszym wypadku najpierw na katalizatorze tworzona jest grupa OH oraz izolowany rodnik cykloheksenyłowy. W drugim, alkohol tworzony jest w jednym etapie, bez wcześniejszej dysocjacji rodnika cykloheksenyłowego. Analiza profili energetycznych zaproponowanych ścieżek reakcji wskazuje, że oddysocjowanie rodnika cykloheksenyłowego (ścieżka 1) jest procesem mniej korzystnym energetycznie ($dE = +53.9$ kJ/mol), niż utworzenie alkoholu po reakcji substratu słabo zasocjowanego na centrum aktywnym katalizatora (ścieżka 2) ($dE = -39.3$ kJ/mol).

Ze szczegółowych badań mechanizmu reakcji utleniania allilowego wynika, że zachodzi ona na skutek oddziaływania wiązania C-H z grupą okso katalizatora wg tzw. oxygen rebound mechanizm. Badania procesu migracji wodoru z cząsteczki substratu na tlen okso sugerują, że wodór łączy się z tlenem okso, gdy kąt C-O-H wynosi 41°. Utworzenie alkoholu, który w kolejnym kroku tworzy addukt z kompleksem MnPCL, następuje po przeniesieniu wodoru.

3.3. Teoretyczne modelowanie procesu selektywnej redukcji tlenków azotu

(prof. Małgorzata Witko, dr Paweł Hejduk)

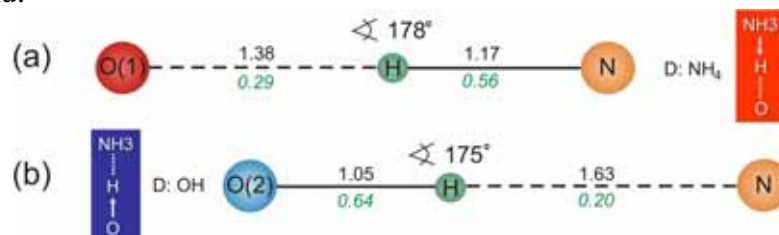
Katalizatory na bazie pięciotlenku wanadu mają szerokie zastosowanie w ochronie środowiska m.in do redukcji tlenków azotu (procesy de- NO_x) w obecności amoniaku w reakcji selektywnej katalitycznej redukcji (SCR). Zastosowanie tych katalizatorów wynika z ich odporności na zatrucia tlenkami siarki. Postulowane są dwa mechanizmy reakcji SCR: Eley-Rideala oraz Langmuir-Hinschelwooda, których wspólną cechą w pierwszym etapie reakcji jest aktywacja reduktora (amoniaku) na powierzchniowych centrach kwasowych bądź to Lewisa (kationy wanadu) w postaci V-NH_3 lub V-NH_2 , bądź Brønsteda (powierzchniowe grupy OH) w postaci V-O-NH_4^+ . Chociaż powszechnie uważa się płaszczyznę (010) za katalitycznie aktywną rozważane są jako miejsca aktywacji reduktora również niewysyczone koordynacyjnie płaszczyzny (001) oraz (100), ze względu na ich możliwą hydroksylację (istnienie powierzchniowych grup OH).

Celem przeprowadzonych obliczeń było zbadanie aktywności katalitycznej różnych płaszczyzn V_2O_5 w procesie aktywacji cząsteczek NH_3 na powierzchniowych grupach OH obecnych na 3 nisko-indeksowych powierzchniach: (010), (001) oraz (100), jako etapu wstępnego w reakcji redukcji tlenków azotu. Wcześniej określono aktywność każdej powierzchni w procesie molekularnej i dysocjatywnej adsorpcji cząsteczek wody. Obliczenia wykonano metodą ab-initio DFT, w przybliżeniu nielokalnym (GGA-RPBE). Jako modeli użyto powierzchniowych klasterów, w których zerwane wiązania wysycano atomami wodoru.

Wyniki obliczeń wskazują, iż cząsteczki wody są stabilizowane spontanicznie na trzech badanych powierzchniach V_2O_5 (ujemne wartości energii adsorpcji: $-0.15 \div -0.71$ eV). Oddziaływanie H_2O - (010) V_2O_5 jest słabym oddziaływaniem elektrostatycznym, podczas gdy na powierzchniach (001) i (100) woda stabilizowana jest przez wiązania koordynacyjne. Na powierzchni (010) nie zachodzi dysocjacja wody, natomiast powierzchnie niewysyczone koordynacyjnie ulegają hydroksylacji (woda dysocjuje), w procesie o zaniedbywalnych barierach energetycznych.

Amoniak ulega stabilizacji na wszystkich powierzchniowych grupach OH na badanych powierzchniach V_2O_5 z utworzeniem wiązań wodorowych według dwóch mechanizmów (Rys.1). Energie adsorpcji wahają się w przedziale od -0.3 eV do -3 eV w zależności od rodzaju centrum adsorpcyjnego i typu płaszczyzny. W większości przypadków produktem adsorpcji jest jon NH_4^+ ; jon ten nie tworzy się na powierzchniach (001) i (100) w okolicy centrum tlenowego O(2). W procesie stabilizacji i tworzenia wiązań wodorowych powierzchniowe grupy OH pełnią rolę grup wodoro-akceptorowych, a w przypadkach centrów tlenowych O(2) na powierzchniach (100) i (001) – grup wodoro-donorowych.

Ponieważ obecność powierzchniowych jonów amonowych NH_4^+ umożliwia aktywację gazowego NO_x , zatem w procesie redukcji NO_x mogą brać udział zarówno powierzchnia wysyciona (010), jak i powierzchnie niewysyczone (100) i (001). Udział powierzchni (001) i (100) wynika z większego prawdopodobieństwa tworzenia się na nich grup hydroksylowych koniecznych do aktywacji amoniaku.



Rys. 1. Schemat mechanizmów tworzenia wiązań wodorowych na centrum (a) O(1) na pow. (010) V_2O_5 oraz (b) O(2) na powierzchni (001) V_2O_5 . D – oznacza grupę wodoro-donorową.

3.4. Właściwości strukturalne i elektronowe metalicznych centrów aktywnych w materiałach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne

(prof. Ewa Broclawik, dr Paweł Rejmak)

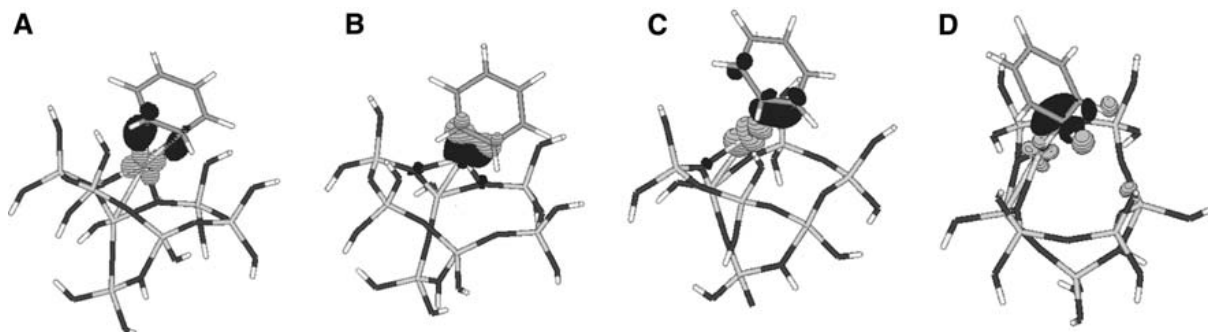
Badania będące przedmiotem zadania miały na celu ilościową analizę przepływów gęstości elektronowej towarzyszącej aktywacji cząsteczki związanej przez katalityczne centrum aktywne. Sumaryczna zmiana ładunków na fragmentach cząsteczki nie daje pełnego obrazu przepływu gęstości elektronowej, gdyż może być wypadkową kilku procesów, które mogą mieć jakościowo różny efekt dla aktywacji poszczególnych wiązań. Znane dotąd procedury numeryczne służące analizie rozkładu ładunków atomowych w cząsteczce nie dają możliwości rozkładu zmian populacji elektronowych (na skutek oddziaływania cząsteczki z centrum aktywnym lub/i innym układem cząsteczkowym) na przyczynki ilościowo opisujące procesy donacji i donacji zwrotnej czy też przepływów o symetrii typu sigma i pi. Wobec tego całkowite zmiany ładunku często nie korelują ze stopniem aktywacji wiązań.

Badania nasze oparte są na nowej metodzie teoretycznej *orbitali naturalnych dla wartościowości chemicznej* (NOCV), zaproponowanej i opublikowanej przez A. Michalaka i M. Mitoraja w 2007 roku. Ponieważ jest to nowa metoda, krótko opiszemy ją poniżej. Orbitalne naturalne to funkcje własne operatora wartościowości chemicznej V zdefiniowanego poniżej:

$$V \varphi_i(r_i) = v_i \varphi_i(r_i), \quad V = 1/2(P - P_0)$$

gdzie P – to macierz ładunków i rzędów wiązań dla układu złożonego, natomiast P_0 – to macierz ładunków i rzędów wiązań promolekuły, czyli układu nie oddziaływujących fragmentów, z których zbudowany jest układ. Wobec tego $\varphi_i(r_i)$ opisuje rozkład przestrzenny elementarnych przepływów gęstości elektronowej (kanałów) a wartości własne v_i opisują udział danego kanału w całkowitym przepływie gęstości.

Wyniki tej analizy pokazują więc zarówno jakościowo (kształt orbitali naturalnych), jak i ilościowo (wartości własne) rodzaj przepływów elektronowych zachodzących w danym procesie. Dla cząsteczki benzenu oddziałującej z centrum miedziowym w zeolicie analiza ta pokazała, że mimo znikającego całkowitego przepływu elektronów, proces ten jest wypadkową donacji (od cząsteczki do centrum aktywnego) i donacji wstecznej (od centrum do cząsteczki), które są istotne, ale znoszą się wzajemnie.



Rys. 1 Kontury NOCV dla orbitali naturalnych wnoszących znaczący wkład do różnicowej gęstości elektronowej dla klastru $[C_6H_6]-[Cu^+M_7]$ opisującego benzen oddziałujący z centrum Cu(I) w zeolicie. Jasne pole oznacza ubytek gęstości, ciemne pole oznacza przyływ gęstości elektronowej.

3.5. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne

(prof. Ewa Broclawik, dr Tomasz Borowski)

W ramach tego zadania statutowego wykonywane są badania teoretyczne struktury elektronowej oraz mechanizmów reakcji dla wybranych centrów metalicznych w enzymach. Prace przeprowadzone w ubiegłym roku obejmowały następujące podzadania.

Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu oksydatywnego rozcięcia polienowego łańcucha karotenoidów katalizowanego przez oksygenazę apokarotenoidów (ACO). Wyniki tych badań pokazują, że dwa mechanizmy mają porównywalnej wielkości bariery reakcji, przy czym, jeden z nich lepiej tłumaczy obserwowaną specyficzność reakcji ACO.

Teoretyczne badania porównawcze mechanizmu utleniającego rozcięcia pierścieni hydrochinonów katalizowanego przez zależne od żelaza i manganu dioksygenazy ekstradiolowe. Uzyskane wyniki pozwoliły na zidentyfikowanie kluczowej różnicy w mechanizmach tych dwóch blisko spokrewnionych oksygenaz: dla Fe-zależnego enzymu reakcja katalityczna przebiega na jednej (kwintetowej) powierzchni potencjalnej, a w przypadku oksygenazy zależnej od Mn, etap determinujący szybkość procesu - rozcięcie wiązania O-O przebiega ze zmianą multipletowości.

Badania nad strukturą elektronową i mechanizmami reakcji utleniania benzenu i jego pochodnych (wpływ podstawników w pierścieniu) przez centrum aktywne cytochromu P450. W roku bieżącym zakończono badania metodą DFT nad mechanizmem modelowego procesu utleniania benzenu przez kation FeO^+ , który jest najprostszą mimiką układu ferrylowego $\text{Fe}^{\text{IV}}\text{O}$, postulowanego jako forma aktywna enzymu. Wyniki doprowadziły do następujących wniosków: (1) Ścieżka reakcji w stanie niskospinowym jest uprzywilejowana; (2) utlenianie aniliny i 3-metyloaniliny zachodzi przez sigma kompleks kationowy; (3) utlenianie benzenu zachodzi przez sigma kompleks kationowo-rodnikowy; (4) podstawniki w pozycji orto i para znacząco zmieniają energetykę procesu utleniania: obecność grupy aminowej i metylowej w pierścieniu fenolowym aktywuje wiązanie C-H w związkach aromatycznych, obniża energię wzdłuż całej ścieżki reakcji ale wpływa niekorzystnie na kinetykę badanej reakcji.

3.6. Opis teoretyczny kinetyki procesów sorpcji stosowanych w technologiach ochrony środowiska

(prof. Władysław Rudziński, dr Tomasz Pańczyk, mgr Wojciech Płaziński)

Adsorpcja na granicy faz roztwór/ciało stałe jest jednym ze zjawisk fizykochemicznych najczęściej wykorzystywanych do oczyszczania wód. Zrozumienie mechanizmów stojących za tym procesem jest kluczowe dla efektywności jego przeprowadzenia.

Jednym z celów badań było opracowanie modeli teoretycznych opisujących kinetykę adsorpcji z roztworów wodnych, uwzględniających zarówno szybkość bezpośredniej adsorpcji molekuł adsorbentu na powierzchni oraz szybkości procesów związanych z dyfuzją. Zostało pokazane, że kinetyka sorpcji barwników może być traktowana jako proces dwustopniowy. W pierwszym etapie całkowita szybkość adsorpcji jest kontrolowana przez szybkość reakcji powierzchniowej. Kiedy ilość zaadsorbowana odpowiada ok. 80% wartości maksymalnej, kinetyka sorpcji staje się bliższa modelowi dyfuzji wewnątrzcząstkowej, opisywanej prawami Ficka. Zaproponowano prostą procedurę numeryczną dla analizy ilościowej danych eksperymentalnych.

Kolejna część badań koncentrowała się na własnościach początkowego etapu procesu sorpcji, mierzonego dla skrajnie niskich czasów. Udowodniono, że obecność punktu przegięcia na izotermie kinetycznej przedstawionej jako (ilość zaadsorbowana) vs. (pierwiastek kwadratowy z czasu) może być efektem połączonego wpływu szybkości reakcji powierzchniowej (wyrażonej poprzez statystyczną teorię transportu międzyfazowego) oraz szybkości dyfuzji adsorbentu do powierzchni. Ten efekt powoduje powstanie pewnego obszaru, bliskiego powierzchni, w którym stężenie adsorbentu jest inne niż to mierzone w części roztworu bardziej odległej od powierzchni.

Ponadto, rozpatrywano zagadnienie wyznaczania wielkości zaadsorbowanych w stanie równowagi na podstawie zmierzonych kinetycznych izoterm adsorpcji. Badania obliczeniowe były prowadzone dla dwóch modeli powierzchni: homogenicznego i heterogenicznego. Wyniki można podsumować następująco: empiryczne równanie "pseudo-second order" jest równaniem niezwykle użytecznym, jeśli chodzi o prostą korelację danych eksperymentalnych. Jednak określanie za jego pomocą równowagowej ilości zaadsorbowanej ma sens tylko, jeśli znaczna część izotermi kinetycznej została zmierzona przy warunkach bliskich równowagowym. Zbadano również wpływ innych czynników, m.in. zmniejszającego się stężenia adsorbentu w roztworze oraz błędów eksperymentalnych.

Statystyczna teoria transportu międzyfazowego, w połączeniu z modelem adsorpcji konkurencyjnej, została użyta do opisu wpływu pH na kinetykę adsorpcji jonów metali ciężkich na powierzchniach heterogenicznych energetycznie. Niejednorodność energetyczna powierzchni została przybliżona dwoma rozkładami energii adsorpcji: quasi-Gaussowskim oraz prostokątnym. Zostało wprowadzone pojęcie „efektywnej heterogeniczności”, które bardzo dobrze reprezentuje połączony efekt oddziaływań bocznych między zaadsorbowanymi jonami (wyrażony przez przybliżenie średniego pola) oraz wpływ heterogeniczności energetycznej.

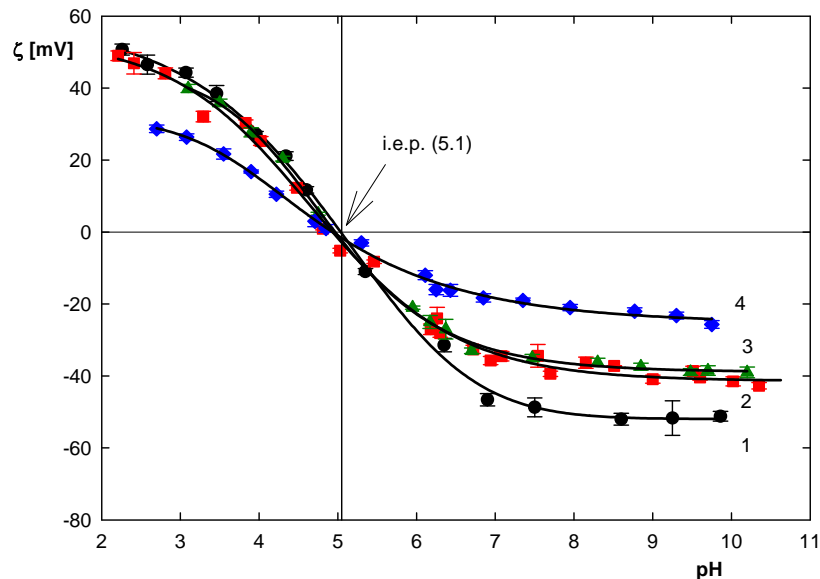
Zbadano wpływ pH na równowagę i kinetykę biosorpcji jonów metali ciężkich. Wprowadzono pojęcie efektywnej pojemności monowarstwy w celu opisu równowagowych izoterm sorpcji mierzonych przy różnych pH. Otrzymane w ten sposób proste wyrażenia matematyczne są w stanie bardzo dobrze opisać wpływ pH na biosorpcję dwóch rodzajów jonów metali na dwóch różnych biosorbentach. Statystyczna teoria transportu międzyfazowego została wykorzystana do wyprowadzenia wzorów na kinetykę biosorpcji, uwzględniających również efekt pH.

4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów

4.1. Określenie właściwości białek globularnych w roztworach elektrolitów pod kątem ich aplikacji jako składników biosensorów

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

Określenie właściwości fizykochemicznych białek w roztworach elektrolitów ma podstawowe znaczenie dla zrozumienia mechanizmów ich immobilizacji na powierzchniach międzyfazowych pod kątem ich zastosowań jako biosensorów. W ramach niniejszego zadania badawczego wyznaczono parametry dwóch podstawowych białek globularnych: albuminy wołowej (bovine serum albumin BSA) oraz albuminy ludzkiej (human serum albumin HSA). Wyznaczono ich współczynnik dyfuzji (promień hydrodynamiczny), ruchliwość elektroforetyczną, lepkość dynamiczną w funkcji ułamka fazy stałej białka dla różnych wartości pH i siły jonowej. Pomiar współczynnika dyfuzji wykazały, że białka te tworzą dimery o zwartym kształcie, który można przybliżyć kształtem sferoidy. Na podstawie tych pomiarów oraz ruchliwości elektroforetycznej wyznaczono efektywny (nieskompensowany) ładunek powierzchniowy białek, jak również ich punkt izoelektryczny (zero ruchliwości), który ma podstawowe znaczenie dla określenia ich stabilności. Punkt ten przypada dla $\text{pH}=5.1$ (Rys. 1), co jest wartością bardziej precyzyjną, niż dotychczas podawane w literaturze. W celu wyznaczenia zakresu stabilności oraz formy tworzonych dimerów przeprowadzono również pomiary lepkości dynamicznej roztworów białek w funkcji ich stężenia. Na tej podstawie wyznaczono współczynnik lepkości wewnętrznej białek, której wartość interpretowano w oparciu o hydrodynamiczny model Brennera. Pozwoliło to na wyciągnięcie wniosku, że rozmiary cząsteczkowe HSA i BSA wynoszą $9.5 \times 5 \times 5$ nm. Jednocześnie pomiary lepkości dynamicznej wykluczyły możliwość tworzenia liniowych agregatów białek o stopniu agregacji wyższym, niż dwa.



Rys. 1. Zależność potencjału zeta HSA od pH, $T = 298$ K. Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane dla różnych sił jonowych: ● $I = 1 \times 10^{-3}$ M, ■ $I = 5 \times 10^{-3}$ M, ▲ $I = 1 \times 10^{-2}$ M, ◆ $I = 0.15$ M

4.2. Wpływ energii kinetycznej na odbicia i czas życia pęcherzyka na swobodnej powierzchni

(prof. Kazimierz Małyśa, dr Marcel Krzan, mgr Jan Zawala, mgr Anna Niecikowska)

Celem zadania było zbadanie wpływu energii kinetycznej pęcherzyka (prędkości w momencie kolizji) na właściwości cienkiego filmu ciekłego powstającego podczas jego kolizji z powierzchnią międzyfazową ciecz/gaz. Badania te miały na celu określenie mechanizmu i podstawowych parametrów odpowiedzialnych za zaobserwowane odbicia się pęcherzyka od powierzchni cieczy oraz określenie wpływu energii kinetycznej pęcherzyka na właściwości i kinetykę rozerwania powstającego cienkiego filmu ciekłego.

W celu określenia wpływu energii kinetycznej pęcherzyka na stabilność filmów powstających w czystej wodzie przeprowadzono eksperymenty, podczas których badano proces kolizji pęcherzyka z granicą międzyfazową ciecz/gaz. Energia kinetyczna pęcherzyków była zmieniana przez zastosowanie kapilar o różnych średnicach oraz poprzez zmianę położenia granicy międzyfazowej. W wodzie destylowanej pęcherzyk poruszający się z prędkością graniczną 34,7 cm/s odbijał się kilkakrotnie od granicą woda/powietrze. Przy tej prędkości można było zaobserwować 4 wyraźne cykle „zderzenie-odbicie”. Równocześnie kształt odbijającego się pęcherzyka zmieniał się gwałtownie w czasach krótszych od 0.85 ms. Z każdym cyklem „zderzenie-odbicie” prędkość pęcherzyka ulegała zmniejszeniu wskutek rozproszenia energii. Zaobserwowano również, że wraz ze zmniejszaniem energii kinetycznej (prędkości pierwszej kolizji) ilość cykli zderzenie-odbicie malała. Odpowiedni dobór energii kinetycznej pęcherzyka pozwalał na obserwację pęknięcia pęcherzyka nawet już w trakcie pierwszej kolizji, kiedy prędkość pęcherzyka wynosiła 8 cm/s.

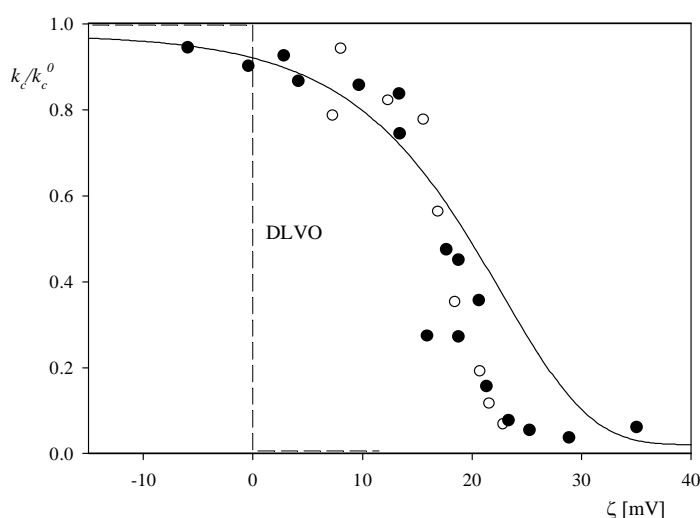
Kiedy pęcherzyk dociera do powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz lub ciecz/ciało stałe to powstaje film ciekły oddzielający pęcherzyk od powierzchni międzyfazowej, który natychmiast zaczyna wyciekać. W trakcie wyciekania powstającego filmu ciekłego następuje równocześnie dyssypacja oraz zamiana energii kinetycznej na energię powierzchniową związaną z deformacją kształtu pęcherzyka oraz powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz. Odbicie pęcherzyka lub jego pęknięcie jest konsekwencją: (i) szybkości wyciekania filmu, oraz (ii) wzrostu energii swobodnej pęcherzyka (deformacji jego powierzchni) spowodowanej przekształceniem energii kinetycznej pęcherzyka w energię powierzchniową. Pęcherzyk pęka, jeżeli podczas kolizji cienki film ciekły osiągnie tzw. krytyczną grubość pęknięcia. W przeciwnym razie pęcherzyk ulega odbiciu. W celu sprawdzenia stopnia zamiany energii kinetycznej pęcherzyka na jego energię powierzchniową wykonano obliczenia energii kinetycznej pęcherzyka tuż przez jego pierwszą kolizję oraz energii powierzchniowej związanej z deformacją kształtu pęcherzyka podczas kolizji. Obliczenia potwierdziły, że podczas kolizji pęcherzyka z powierzchnią ulegającą deformacji (woda/powietrze) transfer energii był dużo mniejszy niż w przypadku niedeformowalnej powierzchni ciała stałego (miki, szkła oraz Teflonu). Energia kinetyczna pęcherzyka jest zatem bardzo ważnym czynnikiem determinującym stabilność cienkich filmów ciekłych powstających w warunkach dynamicznych i jest to związane bezpośrednio z wielkością promienia powstającego filmu. Im powstający film ma większy promień, tym czas potrzeby do jego wycieknięcia jest dłuższy i tym większe jest prawdopodobieństwo, że energia kinetyczna pęcherzyka zamieni się na jego energię powierzchniową i nastąpi odbicie. Wykazano, że w momencie pęknięcia rozmiar filmu ciekłego gaz/ciecz/gaz był zawsze taki sam, niezależnie od początkowej energii kinetycznej pęcherzyka.

5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe

5.1. Wyznaczenie korelacji między konformacją i kształtem cząsteczki polielektrolitów, a kinetyką i strukturą tworzonych monowarstw cząstek koloidalnych

(prof. Zbigniew Adamczyk, mgr Anna Bratek-Skicki, dr Maria Zembala, dr Barbara Jachimaska, dr Małgorzata Nattich, doc. Paweł Weroński)

Określenie oddziaływań cząstek koloidalnych i biokoloidalnych z powierzchniami granicznymi ma istotne znaczenie, gdyż umożliwia optymalizację nowych technologii związanych z selektywną separacją cząsteczek DNA, białek, wirusów, komórek patologicznych, itp. Efektywność tych procesów jest często zwiększana przez użycie substancji wiążących, najczęściej polielektrolitów, spełniających rolę centrów aktywnych. Głównym celem przeprowadzonych badań było więc wyznaczenie korelacji między potencjałem elektrokinetycznym powierzchni pokrytej biwarstwą polielektrolitów, a kinetyką osadzania cząstek koloidalnych. Pomiarów prowadzono dla dodatnio naładowanych lateksów polistyrenowych przy użyciu naczynka przepływowego dla miki pokrytej biwarstwą PEI/PAA (polietyleno imina/kwas poliakrylowy). Skład biwarstwy, w szczególności gęstość warstw polielektrolitów regulowano przez ich dyfuzyjną adsorpcję z roztworów o różnych stężeniach. Wyniki pomiarów przedstawiono na Rys. 1 w formie zależności zredukowanej stałej szybkości osadzania k_c/k_c^0 od średniego potencjału zeta powierzchni ζ (wyznaczonego przy pomocy metody potencjału przepływu). Jak można zauważyć, wyniki doświadczalne mogą być dobrze opisane naszym modelem teoretycznym opartym na koncepcji fluktuacji ładunku powierzchniowego (linia ciągła na Rys. 1), natomiast powszechnie stosowana w literaturze teoria DLVO, oparta na modelu równomiernego rozłożenia ładunku (linia przerywana na Rys. 1) daje wyniki całkowicie rozbieżne. Można więc wysunąć wniosek, że uzyskane wyniki doświadczalne potwierdzają ilościowo hipotezę heterogenicznego rozkładu ładunku na powierzchniach międzyfazowych, stosowaną dotychczas jedynie w sposób jakościowy. Ponadto wyniki te wskazują, że metodyka oparta na bezpośrednich pomiarach kinetyki osadzania cząstek jest precyzyjnym narzędziem dla określania stopnia heterogeniczności powierzchni.

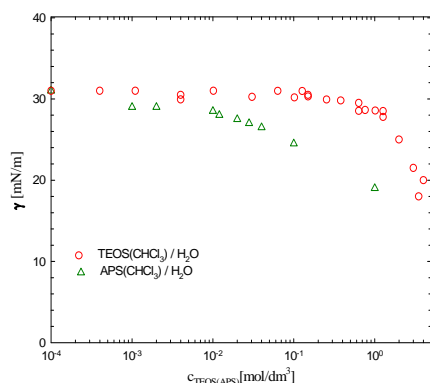


Rys. 1. Zależność zredukowanej szybkości osadzania cząstek k_c/k_c^0 od średniego potencjału biwarstwy PEI/PAA ζ wyznaczona przy pomocy metody potencjału przepływu (punkty). Linia ciągła pokazuje wyniki teoretyczne obliczone na podstawie teorii fluktuacji ładunku, linia przerywana wynik obliczone na podstawie teorii DLVO. $I=10^{-2}$ M, $\text{pH} = 5.5$.

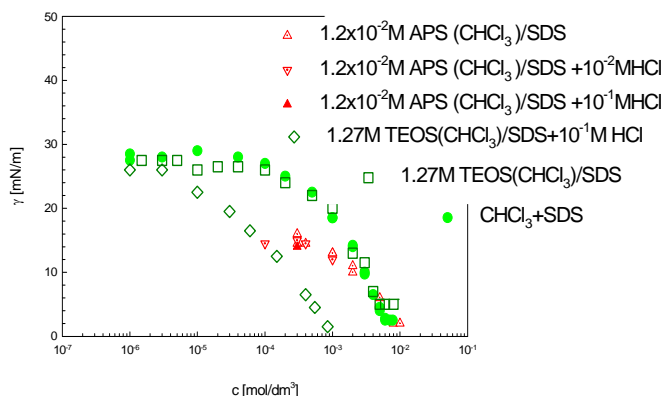
5.2. Właściwości powierzchni międzyfazowych i emulsyfikacja w układach chloroform –TEOS i chloroform – APS w roztworach surfaktantów

(prof. Piotr Warszyński, dr Grażyna Para, mgr inż. Dorota Dronka-Góra,
mgr Krzysztof Szczepanowicz, inż. Marzena Noworyta)

Badano własności międzyfazowe wybranych układów chloroform–TEOS(APS)/roztwór surfaktantu, celem określenia najkorzystniejszych warunków otrzymywania emulsji. Emulsje wykorzystywano jako ciekłe rdzenie do wytwarzania mikrokapsulek poprzez hydrolizę i kondensację związków krzemowych TEOS-u (tetraethylorthosilicate) i APS-u ((3-aminopropyl)triethoxysilane) wewnątrz kropelek emulsji. Pomiary dynamicznego napięcia międzyfazowego układów chloroform-TEOS(APS)/roztwór wodny wykonywano metodą analizy kształtu wiszącej kropli. Rysunek 1 przedstawia zależność równowagowego napięcia międzyfazowego od stężenia dla wybranych układów. APS jest bardziej powierzchniowo aktywny niż TEOS dzięki obecności grupy aminowej połączonej z łańcuchem propylowym. Adsorpcję TEOS i APS na granicy faz chloroform-roztwór wodny zbadano w obecności anionowego surfaktantu SDS. Na Rys. 2. przedstawiono izotermę adsorpcji SDS na granicy faz chloroform/roztwór wodny. Obecność TEOS w chloroformie nie wpływa na zmianę napięcia międzyfazowego, natomiast dodatek APS powoduje znaczące obniżenie napięcia międzyfazowego (około 15 mN/m). Badania te zostały wykonane również w warunkach kwasowej hydrolizy. W obecności HCl obserwujemy obniżenie napięcia międzyfazowego dla układu chloroform-TEOS/SDS, wynikające z dodatkowej adsorpcji SDS na skutek neutralizacji ładunku zaadsorbowanych cząsteczek SDS przez jony H^+ . W przypadku układu chloroform-APS/SDS napięcie międzyfazowe nie ulega zmianie w obecności HCl. APS adsorbuje się na granicy faz chloroform-roztwór wodny nadając powierzchni dodatni ładunek związany z powstaniem grup ($-NH_3^+$). W tych warunkach jony APS^+ tworzą z jonami DS^- kompleks APS -DS. Do wytworzenia stabilnych emulsji dla wybranych układów użyliśmy TWEEN 80 (polyoxyethylene(20) monooleate sorbitan). Adsorpcja TWEEN 80 na granicy faz chloroform/woda powoduje obniżenie napięcia międzyfazowego do 13 mN/m. Napięcie międzyfazowe obu układów (chloroform TEOS(APS)/TWEEN 80) w warunkach hydrolizy kwasowej nie ulega zmianie. Posługując się wynikami tych badań wytworzono stabilne mikroemulsje zawierające 20% roztwór TEOS stabilizowany TWEEN 80 w obecności kwasu oleinowego (dodanego celem zmiany ładunku powierzchni) i miniemulsje zawierające 5, 10, 20% APS stabilizowanego TWEEN80.



Rys 1. Adsorpcja TEOS i APS na granicy faz chloroform / woda



Rys. 2. Adsorpcja SDS na granicy faz chloroform / woda w obecności lub nieobecności TEOS (APS) oraz adsorpcja wybranych układów w warunkach kwasowej hydrolizy

5.3. Elektroaktywne cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanostrukturami węglowymi

(prof. Piotr Warszyński, mgr Jerzy Superata)

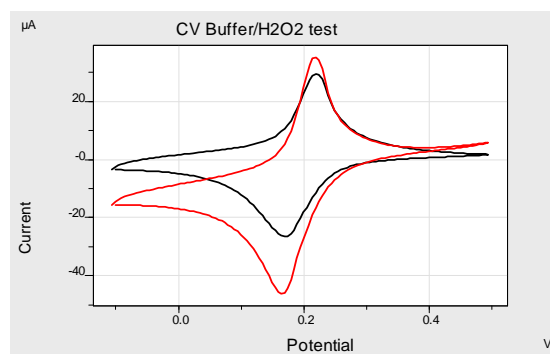
Badania w roku bieżącym koncentrowały się na modyfikacji powierzchni technikami samoorganizacji molekularnej i supramolekularnej, a w szczególności na budowaniu multiwarstw hybrydowych.

Multiwarstwy tworzone były z naprzemiennie osadzanych polielektrolitów syntetycznych: poliwinylpirydyna [PVP], chlorek poli(di)alilodimetyloamoniowy [PDDA], poli(4-styrenosulfonian) [PSS] lub biopolimerów (chitosan) oraz nanocząstek błękitu pruskiego [PB]. Struktury multiwarstw były również wzbogacane preparatami wielościennych nanorurek węglowych [MWNT], które z kolei były uprzednio modyfikowane chemicznie lub fizycznie (niekowalencyjne kompleksowanie polielektrolitami).

Otrzymano w ten sposób szereg mikroelektrod, których właściwości sensorowe porównywano wykonując testy elektrokatalityczne wobec nadtlenu wodoru techniką cyklicznej woltamperometrii. Skonstruowane zostały specjalne minicelki elektrochemiczne, umożliwiające szybką i wygodną wymianę mikroelektrod i/lub roztworów.

Natomiast struktury nanomateriałów węglowych oraz warstwy powierzchniowe mikroelektrod obrazowane były techniką skaningowej mikroskopii elektronowej z analizą rentgenowską.

Rys. 1. Reprezentatywny wynik porównawczego testu elektrochemicznego techniką CV dla mikroelektrody zmodyfikowanej multiwarstwą z PVP, MWNT oraz PB; widoczny wyraźny efekt elektrokatalityczny dla pomiaru w obecności H_2O_2 (czerwony skan) w stosunku do pomiaru w nieobecności H_2O_2 (czarny skan)



Przeprowadzone doświadczenia potwierdziły przydatność technik tworzenia multiwarstw do modyfikowania właściwości strukturalnych i funkcjonalnych powierzchni, w szczególności do zastosowań sensorowych.

Otrzymano nowe mikroelektrody zmodyfikowane multiwarstwami zawierającymi nanorurki węglowe, o dobrej charakterystyce elektrochemicznej dla selektywnej detekcji nadtlenu wodoru.

Wyniki pomiarów wskazują również dalsze kierunki doskonalenia preparatyki; zarówno w zakresie nanomateriałów węglowych (wymiary, proporcje, stopień agregacji, ładunek, grupy funkcyjne), jak i innych komponentów wytwarzanych multiwarstw w celu otrzymania struktur o jeszcze lepszych parametrach funkcjonalnych.

6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

6.1. Monitorowanie stanu powierzchni obiektów zabytkowych przy zastosowaniu metod optycznych

(doc. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, dr Michał Łukomski, mgr Łukasz Lasyk)

Wykrywanie, charakterystyka oraz śledzenie rozwoju uszkodzeń powierzchni malarskich przy użyciu nieinwazyjnych, bezkontaktowych technik jest bardzo ważnym zadaniem dla nauki wspierającej konserwację, szczególnie, że dzieła sztuki są z reguły bardzo wrażliwe i równocześnie bardzo cenne.

W ramach prowadzonych badań rozwinięto interferometryczne metody analizy stanu zachowania powierzchni. W wyniku tych badań powstał interferometr plamkowy (ESPI – electronic spackle pattern interferometr), który następnie przetestowano w obiektach zabytkowych i w laboratorium. Zastosowana metoda pomiarowa opiera się na analizie wywołanych dźwiękiem drgań badanej powierzchni. Fala dźwiękowa może powodować wibrację odspojonego fragmentu warstwy dekoracyjnej, gdy częstotliwość dźwięku jest dostatecznie bliska jego częstotliwości rezonansowej. Amplituda drgań odspojonych fragmentów warstwy dekoracyjnej może być mierzona z dokładnością do dziesiątków nanometrów. Rozwój zniszczenia dokonuje się przez obserwację amplitudy wibracji, rozmiaru odspojonego obszaru jak również poprzez monitorowanie przesunięcia rezonansowej częstotliwości wywołanej następującymi po sobie bodźcami niszczącymi. Częstotliwość rezonansowa odspojenia jest najbardziej czułym parametrem wyznaczanym przez zbudowany układ pomiarowy. Co więcej parametr ten jest niezależny od wzajemnego ustawienia kamery, głośnika i obiektu oraz od amplitudy użytego dźwięku. W związku z tym jest on najlepszym wskaźnikiem postępującego procesu zniszczenia badanej powierzchni.

Przeprowadzono szeroko zakrojony program testów na próbkach imitujących polichromowane drewno. Opracowana technika pomiarowa okazała się być przydatna do wyznaczania mapy prostopadłych do powierzchni obiektu przemieszczeń warstwy malarskiej z dokładnością do ułamków mikrometra. Umożliwia ona również wykrywanie rys, mikro- pęknięć i innych niedoskonałości powierzchni.

PROJEKTY BADAWCZE WŁASNE

1. Wpływ położenia metalu przejściowego w strukturze heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną i na mechanizm reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych

Projekt badawczy 3 T09S 092 29 [2005-2008]

(kierownik projektu: dr Katarzyna Pamin)

Lotne związki organiczne (LZO) są związkami, które mają zdolność łatwego odparowywania już w temperaturze pokojowej. Są to zwykle związki, które w swoim składzie zawierają atom węgla, takie jak aldehydy, ketony czy węglowodory. LZO są powszechnie obecne w codziennym życiu jako składniki farb, tworzyw sztucznych i kosmetyków. Spośród nich znaczną frakcję stanowi formaldehyd. Głównym źródłem pochodzenia formaldehydu w środowisku jest motoryzacja, jest on produktem spalania metanolu będącego jednym ze składników olejów paliwowych. Głównymi produktami całkowitego spalania metanolu są woda i dwutlenek węgla, ale w trakcie reakcji powstają też produkty pośrednie takie jak: eter dimetylowy, formaldehyd i tlenek węgla.

Świadomość szkodliwego działania LZO spowodowało zainteresowanie się opracowywaniem nowych technologii usuwania tych zanieczyszczeń. Spośród różnych znanych technologii usuwania LZO najczęściej stosuje się spalanie termiczne i spalanie katalityczne. Spalanie termiczne wymaga stosowania temperatur rzędu 750°C, natomiast spalanie katalityczne można prowadzić w znacznie niższych temperaturach, rzędu 200-500°C.

Celem projektu było określenie właściwości katalitycznych serii soli manganowych kwasów fosfowolframowego (HPW) i fosfomolibdenowego (HPMo): $H_2Mn_{0.5}PW_{12}O_{40}$, $HMnPW_{12}O_{40}$, $Mn_3(PW_{12}O_{40})_2$, $H_2Mn_{0.5}PMo_{12}O_{40}$, $HMnPMo_{12}O_{40}$, $Mn_3(PMo_{12}O_{40})_2$ w reakcji całkowitego spalania metanolu. Testy katalityczne prowadzono w reaktorze przepływowym, w zakresie temperatur 100-500°C przy stężeniu metanolu 1 g/m³ i GHSV=10.000 h⁻¹. Badane katalizatory były charakteryzowane za pomocą analizy termicznej i rentgenograficznej. Zmiany w rentgenogramach i derywatogramach badanych katalizatorów potwierdzają otrzymanie soli o zmieniającej się zawartości manganu w próbkach.

Wszystkie badane katalizatory w reakcji spalania wykazały wysoką aktywność, głównymi produktami reakcji były eter dimetylowy, tlenek węgla i dwutlenek węgla, z czego pierwsze dwa należą do produktów przejściowych w reakcji spalania metanolu. Obydwie serie soli Mn²⁺ kwasów fosfomolibdenowego i fosfowolframowego uzyskały konwersję rzędu 90- 95%, w zakresie badanych temperatur od 300 - 500°C. W zakresie temperatur od 100- 250°C konwersja metanolu oscylowała wokół wartości od 10 – 80%. Badane sole manganowe obydwu kwasów charakteryzują się wysoką selektywnością do eteru dimetylowego już w temperaturze 150°C. Najwyższy stopień selektywności osiągają w temperaturze 200°C. Selektywność zmniejsza się dopiero powyżej temperatury 300°C, wówczas kierunek reakcji przesuwają się w stronę tlenku i dwutlenku węgla. Badane sole manganu wykazują wysoki stopień konwersji, przy czym sole kwasu fosfowolframowego wykazują wyższy stopień selektywności do CO₂, co stanowi o ich lepszych właściwościach katalitycznych. Niestety podczas spalania pojawia się tlenek węgla, który, jest niepożądanym produktem przy usuwaniu lotnych związków organicznych z powietrza. Jego obecność w produktach reakcji w ilości do 40% wpływa niekorzystnie na możliwości zastosowania badanych katalizatorów w reakcji spalania metanolu.

2. Zastosowanie makrocyclicznych kompleksów metali przejściowych: metaloporfiryn, metaloftalocyjanin i metalosalenów do katalitycznego utleniania propylenu

Projekt badawczy 3 T09B 091 29 [2005-2008]

(kierownik projektu: dr Jan Połtowicz)

Wykonane badania składały się z dwóch etapów. W pierwszym etapie zsyntezowano ok. 20 makrocyclicznych ligandów porfiryńowych, ftalocyjaninowych i salenowych o różnej strukturze, oraz ok. 30 kompleksów salenowych, porfiryńowych i ftalocyjaninowych z różnymi metalami i ligandami aksjalnymi. Wybrane, najbardziej aktywne kompleksy były heterogenizowane na różnych nośnikach. Otrzymane związki scharakteryzowano za pomocą różnych technik fizykochemicznych, takich jak UV-vis, FT-IR, EPR, NMR oraz cyklicznej woltametrii.

W drugim etapie zbadano właściwości katalityczne otrzymanych makrocyclicznych kompleksów w procesie epoksydacji propylenu. Przebadano trzy układy katalityczne w zależności od rodzaju użytego czynnika utleniającego.

Pierwszy system to układ gdzie czynnikiem utleniającym był tlen cząsteczkowy w obecności aldehydu jako czynnika redukującego. Jako katalizatory reakcji epoksydacji propylenu użyto trzy rodzaje metaloporfiryn: kompleksy posiadające to samo centrum metaliczne a różną strukturę makrocyclicznego pierścienia, porfiryńy z różnym centrum metalicznym ale z tym samym pierścieniem makrocyclicznym i trzecia grupa to katalizatory z tym samym pierścieniem porfiryńowym i centrum metalicznym a różnym ligandem aksjalnym. Aktywność metaloporfiryn wzrasta ze wzrostem ilości elektrono-akceptorowych podstawników w strukturze ligandu porfiryńowego. Otrzymano następujący szereg aktywności w zależności od użytego centrum metalicznego:



Pokazano, że wzrost charakteru elektrono-donorowego aksjalnego ligandu powoduje wzrost aktywności metaloporfiryn. Zbadano wpływ rodzaju ko-katalizatora aldehydu na wydajność produktów reakcji i okazało się, że wzrost długości łańcucha aldehydu powoduje zmniejszenie ilości produktów reakcji. Najlepsze rezultaty otrzymano stosując aldehyd propionowy i izobutyłowy.

W drugim układzie stosowano jako czynnik utleniający wodoronadtlenek ROOH lub H₂O₂ a katalizatorami były metalokompleksy salenowe. Zbadano wpływ charakteru podstawników w makrocyclicznym pierścieniu, rodzaju metalu centralnego oraz rodzaju rozpuszczalnika na aktywność katalityczną otrzymanych metalokompleksów. Pokazano, że zarówno katalizatory z podstawnikami elektrono-donorowymi, jak i elektrono-akceptorowymi są aktywne w procesie epoksydacji propylenu i ich aktywność katalityczna wzrasta wraz ze wzrostem ilości podstawników. Rodzaj metalu centralnego ma również wpływ na aktywność katalityczną metalokompleksów salenowych. Otrzymano następujący szereg aktywności:



Wszystkie kompleksy Mn(III) salenowe były bardziej aktywne niż kompleksy Mn(II) salenowe. Określono również wpływ rodzaju rozpuszczalnika na aktywność katalityczną metalokompleksów. Najlepszymi rozpuszczalnikami okazały się acetonitryl i tetrahydrofuran, czyli rozpuszczalniki o niskiej liczbie donorowej. Wszystkie katalizatory użyte do epoksydacji propylenu wykazywały konwersję od 10-40 % i wysoką selektywność w granicach 80-95%.

Trzeci badany układ z nadftalanem magnezu (MMPP) jako czynnikiem utleniającym, metaloftalocyjaninami jako katalizatorami i zasadami azotowymi jako kokatalizatorami utleniania propylenu zgłoszono do opatentowania (głoszenie patentowe P-386720).

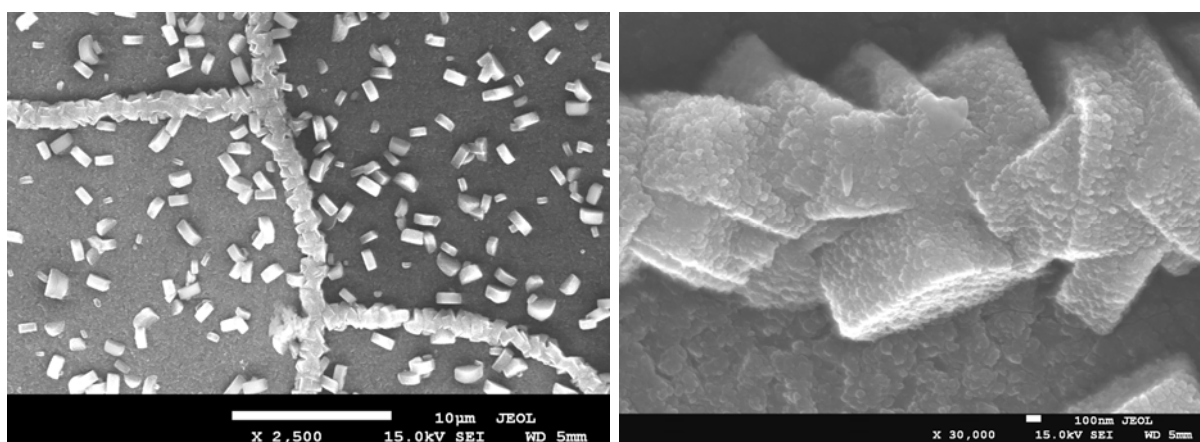
3. Membrany na bazie zeolitów typu MFI, FAU i BEA jako nowe nanomateriały dla procesów rozdzielania mieszanin węglowodorów

Projekt badawczy 3 T09A 029 29 [2005-2008]
(kierownik projektu: doc. Mirosław Derewinski)

Unikalne właściwości kształtoselektywne zeolitów, ich wysoka stabilność termiczna oraz odporność chemiczna spowodowały, że cienkie filmy na bazie zeolitów (membrany zeolitowe) od szeregu lat są przedmiotem intensywnych badań. Obok trudności z otrzymaniem dużych, jednorodnych powierzchni filmów zeolitycznych, jedną z przyczyn ograniczających szersze wykorzystanie membran nieorganicznych na bazie sit molekularnych są częste pęknięcia warstwy filmu osadzonej na porowatym nośniku. Pęknięcia pojawiają się najczęściej w trakcie kalcynacji membran w wysokich temperaturach, prowadzonych w celu usunięcia cząsteczek organicznego szablonu, zaokludowanych w kryształach zeolitu tworzących warstwę. Problem powstawania nieciągłości filmu zeolitego występuje szczególnie często w przypadku membran na bazie zeolitów wysokokrzemowych, np. MFI i BEA, których otrzymanie wymaga stosowania związków alkiloamonioowych jako szablonów.

Celem badań prowadzonych w okresie sprawozdawczym było opracowanie metody, pozwalającej na efektywne usuwanie pęknięć filmu, co jest warunkiem praktycznego wykorzystania membran zeolitycznych. Syntezy filmów typu MFI prowadzono metodą *wtórnego wzrostu*, na powierzchni stałego nośnika korundowego, zmieniając parametry syntezy (temperatura i czas, skład chemiczny roztworu, z którego prowadzono syntezę, warunki kalcynacji membran, ilość nanoszonych warstw).

Opracowano metodę wielokrotnej syntezy pozwalającej na selektywny wzrost kryształów w miejscach pęknięcia utworzonego wcześniej i kalcynowanego filmu zeolitego MFI (Rys.1). Syntezy prowadzono w zakresie temperatur 130÷175°C, stosując różne czasy syntezy warstw oraz różny skład chemiczny żelu (Si/Al=30÷70). Ograniczone, w porównaniu tworzeniem kryształów w pęknięciach filmu, powstawanie nowych kryształów na ciągłej powierzchni w nieznacznym stopniu zmienia warunki transportu składników mieszanin przez warstwę. Opracowana metoda pozwala na otrzymanie ciągłych membran, które nie wymagają dalszej wysokotemperaturowej obróbki, co zmniejsza możliwość uszkodzenia „naprawionego” filmu zeolitego.



Rys.1. Zdjęcia SEM powierzchni membrany typu ZSM-5 (Si/Al=30) po kalcynacji, oraz powtórnej syntezie hydrotermalnej w temperaturze 150°C

4. Badania efektywności aktywacji wodorowej naniesionych katalizatorów na osnowie nanocząstek złota

Projekt badawczy 1 T09A 094 30 [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Erwin Lalik)

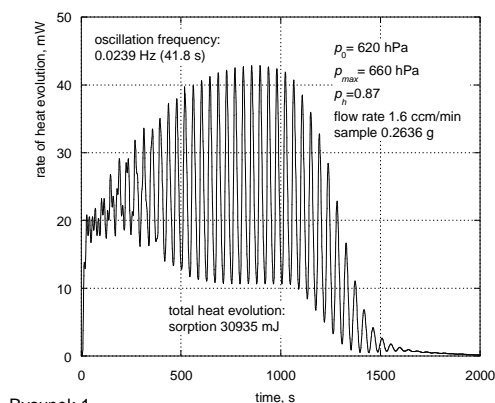
Projekt dotyczy badania wpływu niewielkich ilości gazów obojętnych na proces aktywacji wodorowej naniesionych katalizatorów na osnowie nanocząstek złota w reakcji niskotemperaturowego utleniania CO do CO₂. W roku 2008 wykonano (1) testy katalityczne wyselekcjonowanych próbek katalizatorów na nośnikach spinelowych i beztlenowych; (2) całościowe monitorowanie wyselekcjonowanych procesów katalitycznych za pomocą połączonych metod mikrokalymetrii i spektroskopii masowej.

(1) Badano katalizatory zawierające 1% nanocząstek złota na nośnikach spinelowych MgCr₂O₄ i FeCr₂O₄ oraz na MgF₂. Eksperymenty składały się z kilku etapów: pomiar aktywności świeżego katalizatora, aktywacja katalizatora w strumieniu H₂ w 150°C przez 30 minut i pomiar aktywności, taktowanie katalizatora w przepływie Ar w 50°C przez 5 minut, ponowna aktywacja katalizatora w strumieniu H₂ w 150°C przez 30 minut i pomiar aktywności. Wyniki zestawiono w Tabeli 1. Interesującym przypadkiem jest Au/MgF₂, ponieważ traktowanie go w H₂ prowadzi do spadku konwersji. Natomiast po traktowaniu w H₂/Ar/H₂ zaobserwowano niewielki wzrost konwersji. Dla porównania, wygrzewanie zdezaktywowanej próbki w powietrzu przez 12h nie doprowadziło do żadnego mierzalnego wzrostu aktywności, a więc traktowanie w H₂/Ar/H₂ może prowadzić do odzyskiwania aktywności przez katalizator.

Tabela 1. Wpływ atmosfery H₂ i Ar na aktywność próbek katalizatora zawierającego 1% Au na nośnikach spinelowych i beztlenowych w reakcji utleniania CO

Katalizator	Temperatura reakcji utleniania CO [°C]	Konwersja CO dla próbki świeżej [%]	Konwersja CO po traktowaniu w H ₂ [%]	Konwersja CO po traktowaniu H ₂ /Ar/H ₂ [%]
Au/MgCr ₂ O ₄	35	21,0	99,8	
Au/MgF ₂	100	43,0	9,5	12,0
Au/FeCr ₂ O ₄	60	0	1,0	5,4

(2) Reakcję utleniania CO katalizują również inne (niż Au) metale szlachetne, takie jak Pd i Pt, na których proces ten zachodzi w wyższej temperaturze bez udziału wodoru. Próby zastosowania aktywacji wodorowej dla obniżenia temperatury reakcji utleniania CO na katalizatorze palladowym doprowadziły do nieoczekiwanego spostrzeżenia, że reakcja wodoru z palladem może przebiegać w sposób oscylacyjny pod warunkiem obecności około 10% gazu obojętnego, takiego jak argon lub azot w mieszaninie z wodorem. Warunkiem wystąpienia oscylacji jest początkowe obniżenie ciśnienia w układzie do ok. 600 hPa, uzyskiwane przy współdziałaniu układu próżniowego spektrometru. Oscylacje są widoczne jako cykliczne zmiany prędkości wydzielania ciepła mierzone mikrokalymetrycznie (Rys.1), towarzyszą im jednak również mniej wyraźne oscylacje ciśnienia cząstkowego wodoru. Mają one charakter nieliniowy, periodyczny lub kwaziperiodyczny, jednak całkowite ciepło reakcji wodoru i palladu pozostaje niezmiennie. Dotychczasowa literatura naukowa nie zawiera doniesień o oscylacyjnym charakterze reakcji wodoru z katalizatorem Pd.



Rysunek 1

5. Mechanizmy tworzenia multiwarstw o kontrolowanej mikroarchitekturze na powierzchniach mechanicznych

Projekt badawczy 1 T09A 123 30 [2006-2009]
(kierownik projektu: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Stale rosnące zainteresowanie zastosowaniami multiwarstw polielektrolitów wymaga obszernych prac nad procesami ich adsorpcji na rzeczywistych powierzchniach, które często są bardzo chropowate i chemicznie heterogeniczne. Dlatego też została zbadana adsorpcja polielektrolitów na szlifowanej i nieszlifowanej stali chirurgicznej, na szlifowanym i pasywowanym tytanie oraz na płytkach silikonowych. Powierzchnie te były pokrywane multiwarstwowymi filmami polielektrolitowymi zbudowanymi z (PAH*/PSS)_n, PEI(PSS/PAH*)_n, gdzie n zmieniało się od 1 do 5 (PAH*-poly(fluoresceinian isotiocyaninowy aliloaminy)HCl, PSS-polisodowy-4-styrenosulfonian, PEI-polietylenoimina). Zbadano wpływ pierwszej warstwy PEI oraz chropowatości powierzchni na formowanie się multiwarstwowego filmu polielektrolitowego na wyżej podanych powierzchniach. Ilość zaadsorbowanego polimeru określana była za pomocą mikroskopu fluorescencyjnego. Grubości tworzonych filmów na szlifowanym krzemie badane były za pomocą elipsometrii.

Zostały sprawdzone właściwości filmów budowanych na szlifowanym i nieszlifowanym krzemie, na szlifowanym i elektrochemicznie pasywowanym tytanie oraz na szlifowanej i nieszlifowanej stali chirurgicznej. Do tworzenia pierwszej warstwy zakotwiczonej film używane było rozgałęzione PEI o różnych masach molowych. Ponieważ na powierzchniach chropowatych takich jak stal i tytan nie są możliwe elipsometryczne pomiary grubości filmów PE, prowadzono obserwacje intensywności fluorescencji filmów polimerowych przy użyciu mikroskopu fluorescencyjnego, które to intensywności zostały skalibrowane z grubościami filmów uzyskanych przez pomiary elipsometryczne na szlifowanych płytkach krzemowych. Używając tej samej techniki dla filmów tworzonych w różnych warunkach na szlifowanych płytkach Si/SiO₂ pokazano dobrą korelację pomiędzy grubością elipsometryczną a intensywnością fluorescencji, która była proporcjonalna do ilości zaadsorbowanego PAH* w filmie PE. Oznacza to, że pomiary fluorescencyjne znakowanych polielektrolitów okazują się być użyteczną techniką w wyznaczaniu ilościowych informacji dotyczących budowy filmów PE na heterogenicznych powierzchniach, gdzie inne metody są trudne do zastosowania.

Prekursorowa warstwa rozgałęzionego PEI, adsorbowana z warunków, w których polikation jest słabo naładowany, powoduje wzrost grubości multiwarstwowego filmu PE oraz ilości zaadsorbowanych polielektrolitów, niezależnie od rodzaju podkładki i jej heterogeniczności. Wykazano, że rozgałęzione PEI użyte jako pierwsza warstwa filmu PE działa jak zakotwicząca sieć dla budowanej na niej multiwarstwy PE. Efekt zależy od masy molowej PEI i siły jonowej roztworu PEI. Nie obserwuje się wzrostu grubości filmów PE, kiedy jako prekursor zakotwiczący film użyte jest silnie naładowane PEI. Boczne oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy silnie naładowanymi cząstkami polimerów są bardziej widoczne, dlatego też tworzą one znacznie mniej jednorodną warstwę niż w przypadku słabo naładowanych polielektrolitów. Dodatkowo słabo naładowane PEI jest bardziej hydrofobowe, co dodatkowo promuje tworzenie gęściejszych warstw niż w przypadku wysoko naładowanych polikationów.

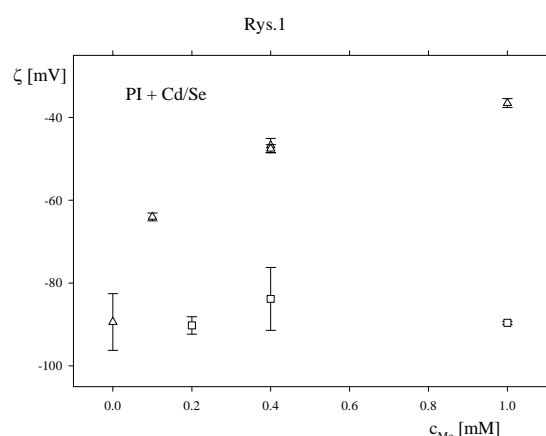
6. Wpływ kadmu i selenu na właściwości powierzchniowe modelowych warstw lipidowych preparowanych na bazie naturalnych błon komórkowych

Projekt badawczy 1 T09A 122 30 [2006-2009]

(kierownik projektu: dr hab. Maria Zembala)

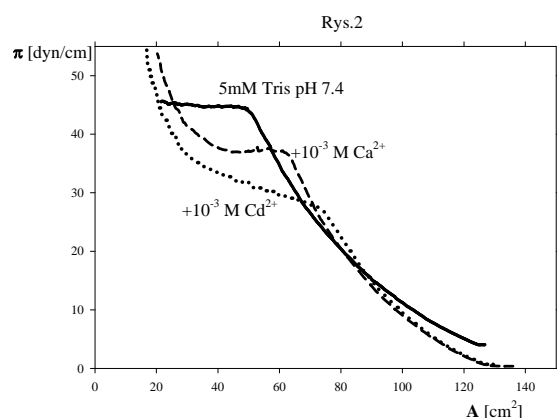
Celem badań prowadzonych w ramach grantu jest określenie wpływu kadmu i selenu na właściwości fizykochemiczne warstw lipidów o różnym charakterze.

Właściwości elektryczne warstw lipidowych określano na podstawie pomiarów potencjałów zeta liposomów. Przebadano liposomy utworzone z DGDG, mieszaniny DGDG+MGDG, PA i PI w zależności od pH buforu (5.4-8.5) oraz w funkcji dodawanych - chlorku kadmu i selenianu sodu, oddzielnie i w mieszaninie. Wszystkie przebadane lipidy (nawet formalnie elektrycznie obojętne)



wykazywały w czystym buforze ujemne potencjały zeta, prawdopodobnie determinowane adsorpcją anionów z roztworu. Dodatek selenianu sodu do buforu nie powodował znaczących zmian potencjału zeta liposomów utworzonych z PI (Rys.1). Potencjał zeta liposomów utworzonych z PA malał ze wzrostem stężenia selenianu odwrotnie niż dla liposomów DGDG, których potencjał zeta wzrastał w miarę zwiększania stężenia jonów selenianowych. Dodatek chlorku kadmu do buforu powodował zwiększenie potencjałów zeta, czego należało oczekiwać biorąc pod uwagę elektrostatyczny efekt kompensacji ujemnego ładunku powierzchni przez dwuwartościowe kationy

kadmu. Potencjały zeta liposomów mierzone w obecności mieszaniny 0.4 mM Cd^{2+} i 0.2 mM SeO_4^{2-} były w granicy błędów równe wartościom mierzonym w obecności kadmu bez dodatku selenianu. Pomiary wpływu obecności jonów kadmu i selenu na izotermy ciśnienia powierzchniowego pokazały, że tylko monowarstwy PA reagowały specyficznie na obecność jonów kadmu (Rys.2). Kształt izotermy $\pi = f(A)$ rejestrowanej w obecności 1 mM $CdCl_2$



wskazywał na istnienie przejścia fazowego pojawiającego się przy ciśnieniu powierzchniowym równym 28 dyn/cm w porównaniu z wartością 37.5 dyn/cm dla warstwy wytworzonej na roztworze zawierającym 1mM jonów wapnia i 45 dyn/cm charakterystycznego dla warstwy utworzonej na czystym buforze. Wynik ten może mieć znaczenie dla zrozumienia specyficznego działania soli kadmu w świetle doniesień literaturowych wskazujących na drogę wnikania jonów kadmu do komórki poprzez kanały wapniowe. Te ostatnie występują głównie w otoczeniu lipidowym zawierającym PA, zatem

modyfikacja właściwości mechanicznych warstwy PA wywołana obecnością kadmu może wskazywać na udział tego jonu w aktywacji/dezaktywacji kanałów jonowych.

7. Teoretyczne badania heterogeniczności powierzchni katalizatorów na bazie tlenków wanadu

Projekt badawczy N204 024 31/0475 [2006-2008]

(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Katalizatory na bazie pięcioletku wanadu z dodatkiem trzeciego pierwiastka takie jak V-O-P czy V-O-Mg znajdują szerokie zastosowanie w wielu procesach przemysłowych, m.in. w reakcjach utleniającego odwodornienia alkanów, czy alkenów. Katalizatory typu V-O-P, charakteryzują się dużym bogactwem faz krystalicznych z atomami wanadu znajdującymi się na różnych stopniach utlenienia, począwszy od 5+ (VOPO_4), poprzez 4+ ($(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$), aż do 3+ (VPO_4). W przypadku katalizatorów typu V-O-Mg atomy wanadu zawsze na 5+ stopniu utlenienia znajdują się w różnym otoczeniu krystalograficznym; najczęściej wykorzystywane to ortowanadan magnezu ($\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$), pyrowanadan magnezu ($\alpha\text{-Mg}_2\text{V}_2\text{O}_7$) i metawanadan magnezu ($\beta\text{-MgV}_2\text{O}_6$).

Celem obliczeń było określenie struktury elektronowej tlenowych centrów powierzchniowych (aktywności katalitycznej) jako funkcji ich koordynacji i typu otoczenia (V/P/Mg). Obliczenia przeprowadzono metodą ab initio DFT (program StoBe) w przybliżeniu klasterowym. Sprawozdanie dotyczy zadania określenia struktury elektronowej VPO_4 i układów V-O-Mg.

Układ VPO_4 charakteryzuje się skomplikowaną strukturą krystalograficzną; wykazuje budowę warstwową, z warstwami równoległymi zarówno do powierzchni (100) jak i (001). Tetraedry PO_4 służą zwiększeniu objętości kryształu (podobnie jak w $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$) separując łańcuchy oktaedrów VO_6 między sobą (powierzchnia 100) lub powodując powstawanie izolowanych oktaedrów VO_6 (powierzchnia 001). Dodatkowo, na obu powierzchniach VPO_4 występuje duża różnorodność centrów tlenowych o różnej liczbie koordynacyjnej, skoordynowanych zarówno do wanadu jak i do fosforu.

Z przeprowadzonej analizy ładunków metodą Mullikena wynika, iż charakter nukleofilowy powierzchniowych centrów tlenowych skaluje się z ich liczbą koordynacji. Na obu badanych powierzchniach tleny fosforanowe (centra O(1)') wykazują największą reaktywność chemiczną; centra fosforowe posiadają silniejszy charakter elektrofilowy (są bardziej kwaśne) od centrów wanadowych, a VPO_4 wykazuje charakter metaliczny.

Wszystkie badane układy V-O-Mg mają mieszany jonowo-kowalencyjny charakter wiązań metal-tlen. Ujemny ładunek na centrach tlenowych wzrasta wraz ze wzrostem koordynacji. Obecność jonów Mg powoduje wzrost ładunku ujemnego na tlenach pojedynczo skoordynowanych do wanadu (ładunek $-0.4 \div -0.45$), w porównaniu z układem V_2O_5 (ładunek -0.37). Dla tlenów mostkowych w obrębie tych trzech układów ładunek zależy nie tylko od liczby skoordynowanych sąsiadów metalicznych i ich charakteru chemicznego (V/Mg), ale również od lokalnej geometrii. Ten sam typ tlenów (O(3) skoordynowany do dwóch atomów Mg i jednego atomu V ma największy ładunek w ugrupowaniu tetraedrycznym (-0.94 w układzie $\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$), najmniejszy w przypadku gdy występuje w otoczeniu oktaedrycznym wanadu (-0.82 w układzie MgV_2O_6). Zależność ładunku od typu koordynacji widoczna jest również w przypadku jonów wanadu. Dodatni ładunek na atomach V jest najniższy w izolowanych tetraedrach VO_4 ($\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$), a największy w jednostkach oktaedrycznych VO_6 (MgV_2O_6). W porównaniu z czystym V_2O_5 ($\text{V}^{+1.59}$), kwasowość centrów wanadowych maleje w układzie ortowanadanu magnezu ($\text{V}^{+1.25}$), nieznacznie wzrasta w układzie metawanadanu magnezu ($\text{V}^{+1.63}$), a w przypadku pirowanadanu magnezu pozostaje na niezmiennym poziomie ($\text{V}^{+1.58}$).

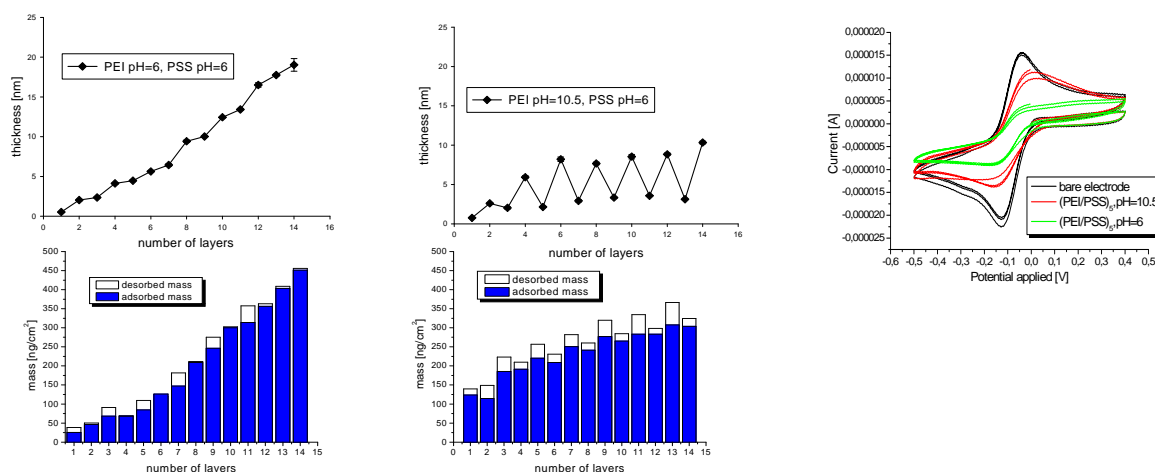
8. Struktura, własności powierzchniowe i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polielektrolitów dla zastosowań w modyfikacji powierzchni i enkapsulacji substancji chemicznych

Projekt badawczy N204 166 31/3734 [2006-2009]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Procesy enkapsulacji i kontrolowanego uwalniania substancji chemicznych stanowią podstawę wielu współczesnych technologii stosowanych w przemyśle farmaceutycznym, kosmetycznym, środków ochrony roślin a nawet poligraficznym. Procesy kontrolowanego uwalniania substancji aktywnych uwięzionych w nano- i mikrokapsułkach są coraz szerzej stosowane w technologiach biomedycznych.. Jedną z najbardziej obiecujących technik wytwarzania wielowarstwowych powłok polielektrolitowych jest sekwencyjna adsorpcja polielektrolitów (PE) z roztworów wodnych, zwana techniką Layer-by-Layer (LbL).

W pracach wykonywanych w ramach projektu skupiono się na wpływie pH na strukturę, stabilność i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polielektrolitowych. Filmy zostały utworzone ze słabego polikationu (usieciowana PEI, 70kDa) oraz mocnego polianionu (PSS, 70 kDa). Dla PEI wybrano dwa warunki osadzania: pH=6, kiedy PEI jest silnie naładowane oraz pH=10.5, gdzie gęstość ładunku jest niska. Kombinacja słabo i silnie naładowanych polielektrolitów w przypadku pH=10.5 dla PEI dała nie monotoniczny wzrost grubości wielowarstwowego filmu, w przeciwieństwie do warunków pH=6, gdzie uzyskano wzrost liniowy. Wyniki elipsometrycznych pomiarów grubości filmów zostały skorelowane z wynikami zaadsorbowanej masy polielektrolitów uzyskanych na mikrowadze kwarcowej, gdzie uzyskano podobne rezultaty. Wykonano także pomiary przepuszczalności przygotowanych filmów techniką woltamperometrii cyklicznej. Stwierdzono, że przepuszczalność filmu utworzonego z silnie naładowanym PEI jest niższa niż w przypadku PEI w pH=10.5. Wyniki zostały zaprezentowane poniżej.



Rys.1. Przedstawienie grubości, masy oraz przepuszczalności wielowarstwowych filmów (PEI/PSS) zaadsorbowanych na powierzchni płytek Si/SiO₂ w dwóch różnych warunkach pH.

Stwierdzono, że w przypadku słabo naładowanego polikationu (PEI pH=10.5) niemonotoniczny wzrost zarówno grubości, jak i masy wynika z tworzenia się słabo związanych kompleksów, które następnie mogą zostać częściowo usuwane podczas kolejnego procesu adsorpcji. Tą hipotezę potwierdzają także wykonane zdjęcia topografii powierzchni AFM.

9. Heteropolikwasy jako katalizatory w reakcji syntezy eteru etylo-tert-butylowego (ETBE) w fazie gazowej

Projekt badawczy N204 164 31/3689 [2006-2009]

(kierownik projektu: dr inż. Anna Micek-Ilnicka)

Celem badań było określenie wpływu wody krystalizacyjnej zawartej w heteropolikwasie typu Keggina $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) i typu Wellsa-Dawsona $H_6P_2W_{18}O_{62}$ (HP2W) na szybkość syntezy jednego z eterów trzeciorzędowych, eteru etylo-tert-butylowego (ETBE).

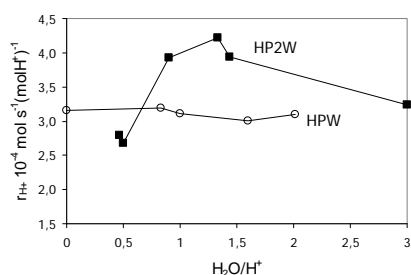
Heteropolikwasy (HPAs) są zazwyczaj otrzymywane w postaci silnie uwodnionych hydratów ($H_3PW_{12}O_{40} \cdot 24H_2O$, $H_6P_2W_{18}O_{62} \cdot 35H_2O$). Woda krystalizacyjna odchodzi ze stałego heteropolikwasu do 200°C. Dalsze ogrzewanie preparatu do 400°C powoduje odejście wody konstytucyjnej (dehydroksylację). Woda jest łatwo absorbowana przez HPAs i tworzy sprotonowane klastry postaci: $(H_2O)H^+$ lub $(H_2O)_2H^+$ etc.

Badania kinetyczne wykonano w reaktorze przepływowym połączonym on-line z chromatografem gazowym. Badania katalityczne były poprzedzone aktywacją próbek, którą wykonywano w reaktorze, w strumieniu helu. Warunki aktywacji (temperatura, czas) były tak dobrane, żeby uzyskać hydraty o różnej zawartości wody krystalizacyjnej. Wszystkie testy katalityczne przeprowadzono w 40°C, czyli w temperaturze maksymalnej aktywności katalitycznej HPA. Szybkość konwersji izobutenu w odniesieniu do liczby protonów zawartych w bezwodnej próbce r_{H^+} , która odpowiadała aktywności katalitycznej, obliczano przy użyciu równania:

$$r_{H^+} [\text{mol} \cdot \text{h}^{-1} (\text{molH}^+)^{-1}] = F \frac{X_{IB}}{n}$$

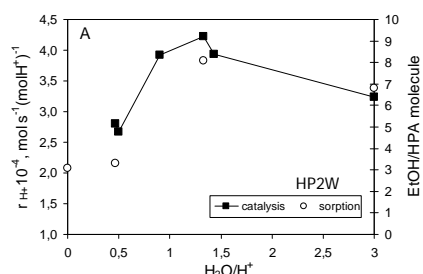
w którym: F – szybkość przepływu izobutenu w strumieniu reakcyjnym [$\text{mole} \cdot \text{s}^{-1}$], n – liczba moli protonów w próbce, X_{IB} – konwersja izobutenu (ułamek molowy).

Rys. 1 przedstawia zależność aktywności katalitycznej $H_6P_2W_{18}O_{62}$ (HP2W) i $H_3PW_{12}O_{40}$



od stopnia uwodnienia protonów $[H_2O]/[H^+]$. Wartość r_{H^+} dla HP2W jest niższa od r_{H^+} dla HPW dla niskich wartości uwodnienia ($[H_2O]/[H^+] < 0.8$). Fakt ten jest zgodny z szeregiem mocy kwasowej (HPW > HP2W) zmierzonej metodą pomiaru ciepła sorpcji amoniaku. Aktywność katalityczna próbek Keggina o zawartości wody krystalizacyjnej jest praktycznie stała. Podczas gdy dla próbek HP2W zarejestrowano maksimum dla $[H_2O]/[H^+] = 1.3$. Jednakże w zakresie $[H_2O]/[H^+] > 0.8$ r_{H^+} dla HP2W jest wyższa od r_{H^+} dla HPW.

Na Rys.2. aktywność katalityczna $H_6P_2W_{18}O_{62}$ w przeliczeniu na 1 mol protonów r_{H^+} , czyli



w zależności od uwodnienia protonów jest porównana z pojemnością sorpcyjną etanolu. Puste punkty przedstawiają sorpcję etanolu (EtOH/ cząsteczka HPA), a punkty pełne dotyczą aktywności katalitycznej. r_{H^+} osiąga maksimum dla $[H_2O]/[H^+] = 1.3$, co odpowiada 8 cząsteczkom wody na anion HPA.

Obserwowana równoległość pomiędzy przebiegiem aktywności katalitycznej i pojemności sorpcyjnej sugeruje, że głównym czynnikiem określającym aktywność heteropolikwasu typu Wellsa-Dawsona jest stężenie etanolu w objętości jego krystalitów.

10. Teoretyczny opis aktywacji tlenu i reaktywności różnych centrów tlenowych w hetero- i homogenicznych molibdenowych układach katalitycznych

projekt badawczy N204 034 31/0795 [2006-2008]

(kierownik projektu: dr R.enata Tokarz-Sobieraj)

Przedstawiony projekt miał celu teoretyczne badania reaktywności centrów tlenowych w katalizatorach molibdenowych, które odgrywają zasadniczą rolę min. w procesach utleniającego odwodornienia alkanów. Tlenowe centra aktywne uczestniczą w reakcji katalitycznej prawie na każdym jej etapie. Zasadowe centra tlenowe zdolne są odszczepić wodór z cząsteczki organicznej tworząc powierzchniowe grupy hydroksylowe bądź wodę. W dalszym etapie reakcji katalitycznej centra tlenowe bądź utworzone z ich udziałem grupy hydroksylowe czy cząsteczki wody, mogą zostać przyłączone do cząsteczki organicznej tworząc prekursorów produktów reakcji selektywnego utleniania, a w dalszej kolejności produkty reakcji. Centra tlenowe uczestniczą też w ostatniej fazie reakcji katalitycznej, jakim jest regeneracja zredukowanego katalizatora. Reutlenianie katalizatora może odbywać się przez adsorpcję tlenu z fazy gazowej, a w przypadku tlenków może zachodzić również poprzez dyfuzję jonów tlenu O^{2-} z głębszych warstw katalizatora.

Jako modelowe układy przebadane zostały katalizatory działające w procesach heterogenicznych: (proste (MoO_3 i MoO_2) i mieszane ($CoO+MoO_3$) tlenki molibdenu) i homogenicznych: (porfiryny molibdenowe). Obliczenia przeprowadzono metodą DFT przy użyciu zarówno modelu klasterowego jak i modelu periodycznego. Wyznaczone zostały parametry elektronowe i geometryczne, tj. ładunki, rzędy wiązań szczegółowe mapy potencjału elektrostatycznego, mapy gęstości elektronowej, wykreślono gęstości stanów elektronowych badanych układów. Dodatkowo przeprowadzono modelowanie procesu aktywacji cząsteczki O_2 i jej dalszej transformacji poprzez adsorpcję wodoru.

Porównując różne typy centrów tlenowych obecnych w strukturze katalizatorów heterogenicznych takich jak proste tlenki MoO_3 , MoO_2 czy tlenki mieszane $CoMoO_4$ znaleziono korelacje pomiędzy reaktywnością centrów tlenowych, a ich liczbą koordynacji czy typem skoordynowanego z nim jonu metalicznego. Wykazano, że nukleofilowość, i mobilność sieciowych atomów tlenu wzrasta wraz ze wzrostem ich liczby koordynacyjnej. Siła wiązania H/2H i stabilność powierzchniowych grup OH zależy od typu koordynacji tlenu, ale zależy również w dużym stopniu od geometrii powierzchni. Obecność dodatkowego jonu metalu (Co) w strukturze układów molibdenowych obniża właściwości zasadowe tlenów sieciowych, zwłaszcza mostkowych.

Przeprowadzone obliczenia jednoznacznie pokazały, że proponowany w literaturze, mechanizm aktywacji cząsteczki O_2 w układach homogenicznych (polegający na adsorpcji O_2 na kompleksie porfirynowym i jej dalszej aktywacji poprzez adsorpcję H/2H aż do utworzenia tlenu oxo) ma również zastosowanie w układach porfiryn molibdenowych. Jak wykazano w obliczeniach poszczególne etapy tego mechanizmu silnie zależą od stopnia utlenienia jonu Mo czy obecności liganda.

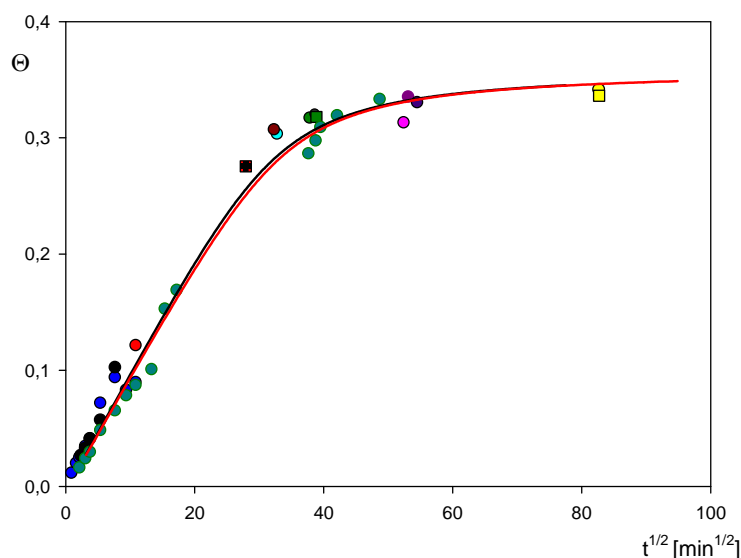
Przeprowadzone obliczenia dowiodły, że pewne etapy tego procesu (adsorpcja i aktywacją cząsteczki tlenu poprzez adsorpcję H/2H) może zachodzić również z powodzeniem na katalizatorach heterogenicznych (MoO_3). W obydwu układach adsorpcja cząsteczki tlen prowadzi do wstępnej aktywacji (wydłużenie i osłabienie wiązania O-O, jako rezultat przekazania elektronów na antywiązący orbital π^*). Adsorpcja wodoru prowadzi do dalszego osłabienia wiązania O-O. Adsorpcja drugiego wodoru prowadzi do utworzenia cząsteczki wody z jednym z tlenów i tlenu podwójnie związanego z jonem molibdenu. Desorpcja wody prowadzi to otrzymania oxo-kompleksu porfirynowego i reutlenionej powierzchni.

11. Nowa metoda wytwarzania nośników nano- oraz mikrokapsularnych o określonej funkcjonalności do selektywnego dostarczania reagentów

Projekt badawczy N205 022 31/1112 [2007-2010]

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Głównym celem przeprowadzonych badań doświadczalnych było ilościowe określenie kinetyki osadzania modelowych mikro i nanokapsulek na powierzchniach międzyfazowych. Jako układy referencyjne w tych badaniach zastosowano monodyspersyjne lateksy polistyrenowe o dodatnim ładunku powierzchniowym i nominalnych rozmiarach frakcji 100, 200, 500 oraz 1000 nm. Przy pomocy metody dynamicznego rozpraszania światła, dyfrakcji laserowej oraz mikroelektroforezy określono precyzyjne rozkłady wielkości cząstek i ruchliwość elektroforetyczną w roztworach elektrolitów, w zależności od siły jonowej oraz pH. Wykazano, że lateksy te zachowują wysoki dodatni potencjał zeta (60-80 mV) w szerokim zakresie pH od 3 do 10, co umożliwia ich efektywne osadzanie na ujemnie naładowanej powierzchni miki. Kinetykę osadzania lateksów badano ilościowo stosując dyfuzyjny mechanizm transportu, przy użyciu mikroskopii optycznej w warunkach *in situ*, oraz mikroskopii sił atomowych (AFM). Typową krzywą kinetyczną uzyskaną dla lateksu A500 (o rozmiarach cząstek 520 nm) przedstawiono na Rys. 1. Jak można zauważyć, wyniki uzyskane tymi dwoma niezależnymi metodami są zgodne w granicach błędów pomiarowych, zarówno jeżeli chodzi o początkową szybkość osadzania, jak również maksymalne pokrycie cząstek. Warto również podkreślić, że wyniki doświadczalne są ilościowo opisywane naszym modelem teoretycznym (krzywa ciągła), w którym nie używano żadnych parametrów empirycznych. Uzyskane wyniki mają znaczenie dla kalibracji procesów osadzania mikrokapsulek w niezbyt precyzyjnie zdefiniowanych warunkach transportu.



Rys. 1. Zależność pokrycia cząstek lateksu na powierzchni miki od pierwiastka z czasu osadzania $t^{1/2}$ (kwadraty oznaczają wyniki uzyskane przy pomocy metody AFM). Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne obliczone z naszego modelu adsorpcji RSA. Lateks A500, $I=10^{-4}$ M, pH=5.5, stężenie cząstek $6 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$, temperatura 297 K.

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

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

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Zadania na rok 2008 obejmowały przygotowanie i charakteryzację nośników i katalizatorów proszkowych i modelowych, oraz testy katalityczne katalizatorów proszkowych i modelowych.

Kontynuowano badania katalizatorów proszkowych nanoAu /FeO_x różniących się warunkami otrzymania oraz temperaturą i atmosferą prażenia prekursorów. Stwierdzono, że właściwości fizykochemiczne układu nano-Au/Fe₃O₄ w różnym stopniu zależą od warunków preparatyki. Temperatura i atmosfera prażenia katalizatorów Au/Fe₃O₄ wpływa na wielkość cząstek Au i ich rozkład, stopień redukcji powierzchni nośnika oraz na właściwości kwasowo-zasadowe układów. Brak jest natomiast wyraźnego wpływu tych parametrów na redukowalność nośnika i stan elektronowy Au. Różnice we właściwościach katalitycznych w reakcji utleniania CO preparatów otrzymanych w różnych warunkach, mogą być przypisane zarówno różnicom w wielkości cząstek, jak i stopniowi redukcji. Najlepszy katalizator (prażony w 400°C w atmosferze Ar) charakteryzuje się dużą ilością małych cząstek Au (1-4 nm) oraz stosunkowo wysokim stopniem redukcji powierzchni i wysoka kwasowością.

Przeprowadzono syntezę preparatów proszkowych Au/MgO o różnym stopniu zdefektowania nośnika, stosując nowy preparat MgO (Aldrich).

Wykonano pomiary XPS dla monokrystalicznych podłoży MgO(001) o różnym sposobie przygotowania powierzchni: łupanie w powietrzu lub próżni, polerowanie, wygrzewanie. Na podłożach scharakteryzowano metodą XPS, przygotowano serię modelowych katalizatorów Au/MgO(001) poprzez naparowanie złota w warunkach ultrawysokiej próżni. Zmierzone widma fotoemisji w funkcji pokrycia Au i obróbki termicznej.

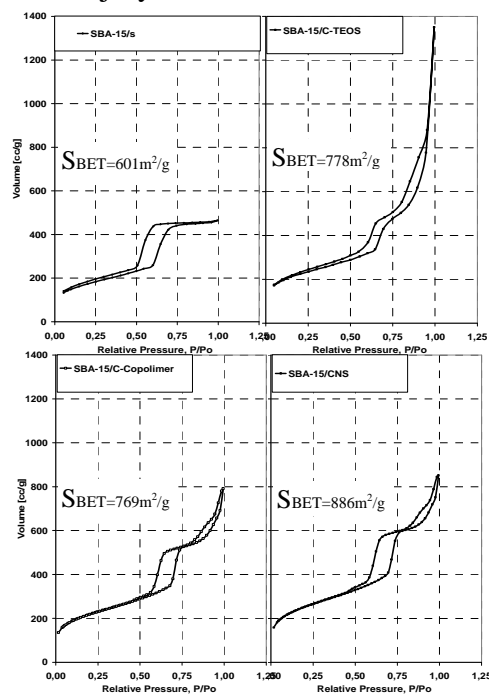
13. Otrzymywanie mezoporowatych struktur typu SBA-15 o hierarchicznym systemie porów przy użyciu nanocząstek węgla lub lateksu jako szablonów strukturalnych

Projekt badawczy N204 166 32/4313 [2007-2009]

(kierownik projektu: dr Małgorzata Zimowska)

Celem niniejszego projektu było opracowanie nowej metody otrzymywania mezoporowatych struktur typu SBA-15 o hierarchicznym systemie porów, przy użyciu nanocząstek węgla jako szablonów strukturalnych. Nowy system porów otrzymano w wyniku wprowadzenia nanocząstek węgla "carbon black" Pearl 2000 do żelu syntezowego na trzy różne sposoby, a następnie ich usunięciu podczas kalcynacji. Badaniom XRD, SEM, HRTEM oraz adsorpcji i desorpcji N₂ poddano materiały: SBA-15/s (SBA-15 otrzymany zgodnie ze standardową procedurą),

SBA-15/C-TEOS (SBA-15 z dodatkiem węgla "carbon black" do TEOS-u), SBA-15/C-Copolymer (SBA-15 z dodatkiem węgla carbon black do kopolimeru) i SBA-15/CNS (SBA-15 z dodatkiem węgla "carbon black" w formie wodnej zawiesiny do kopolimeru). Analiza SEM wykazała zmianę morfologii materiału krzemionkowego oraz jego rozdrobnienie spowodowane wprowadzeniem nanocząstek węgla. W wyniku modyfikacji materiału SBA-15 szablonem węglowym tworzą się obok siebie dwie współistniejące fazy o różnym uziarnieniu: faza typu SBA-15 i drobnoziarnista, krzemionkowa faza amorficzna, niewidoczna w XRD. Materiał SBA-15/s otrzymany zgodnie z procedurą posiada ziarna wielkości 2 μm, podczas gdy wprowadzenie nanocząstek węgla do kopolimeru powoduje powstanie obok fazy amorficznej, regularnych, wydłużonych ziaren typu SBA-15, nie większych niż 1 μm, przypominających pryzmy heksagonalne, będących odzwierciedleniem heksagonalnego upakowania. Wprowadzenie zawiesiny węglowej wykazuje podobny charakter, ale ziarna krzemionki typu SBA-15 są bardziej płaskie. W materiale SBA-15/C-TEOS większy udział ma amorficzna faza o mniejszym uziarnieniu. Dodatek węglowego szablonu nie zmienia struktury charakterystycznej dla materiału SBA-15, ale powoduje przesunięcie refleksu (100) w kierunku niższych wartości 2θ, co jest równoznaczne z przesunięciem wartości d₁₀₀ z 81.4 Å w SBA-15/s do 88.9 Å w SBA-15/C-TEOS oraz 93,1 Å w SBA-15-C/Copolymer i 94,6 Å w SBA-15/CNS. Zmiana warunków syntezy powoduje nieznaczne zwiększenie się porów w materiale krzemionkowym. Rozkład wielkości porów w SBA-15/s wskazuje na obecność jednorodnych porów o średnicy ok. 43,6 Å, podczas gdy dodatek węgla przesuwa maksimum do 53-56 Å. Dodatkowo, w każdej modyfikowanej próbce, obserwowane jest pojawienie się nowego szerokiego maksimum powyżej 120 Å, pochodzącego z amorficznej krzemionki. Izoterma adsorpcji/desorpcji azotu zarejestrowana dla SBA-15/s przypisana typowi IV, z pętlą histerezy typu H1 – wskazuje na charakterystyczny dla materiałów mezoporowatych cylindryczny, dobrze uporządkowany układ porów. Izoterma adsorpcji/desorpcji azotu zarejestrowana dla SBA-15/C-TEOS, SBA-15/C-Copolymer i SBA-15/CNS wykazuje odmienny kształt z sekwencją dwóch pętli histerezy. Pierwsza pętla histerezy jest podobna do pętli obserwowanej w przypadku SBA-15/s, drugą pętlę możemy przypisać większym mezoporom, kształtem przypominającym, tzw. "ink bottle pores".



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

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

(kierownik projektu: doc. Ryszard Grabowski)

Współczesne wymagania stawiane technologiom przemysłowym wymuszają stosowanie aktywnych i wysoce selektywnych katalizatorów reakcji chemicznych. Stosowane w katalizie związki makrocykliczne spowodowały zainteresowanie chemią supramolekularną. Receptory molekularne to układy zdolne do wiązania cząsteczek lub jonów w aktywnych fragmentach swojej struktur na zasadzie kompleksów gość-gospodarz (receptor). Syntetyczne receptory molekularne można otrzymać przez trwałe osadzenie receptora na powierzchni materiału, a przez to nadanie mu charakteru wielofunkcyjnego w konsekwencji powodując wzrost selektywności w procesie rozpoznawania molekularnego. Tak sfunkcjonalizowane receptory znajdują zastosowanie w otrzymywaniu miniaturowych katalitycznych nano-reaktorów czy też nano-sensorów.

Metalokompleksy są znane jako aktywne i selektywne katalizatory procesów utleniania związków organicznych w łagodnych warunkach. Dobierając odpowiedni polimer oraz kompleks metalu przejściowego otrzymujemy specyficzny rodzaj nano-reaktora. Jako matryce dla nano-reaktorów katalitycznych zastosowano chitosan (Mw 390kDa), naturalny polisacharyd, który dzięki obecności grup aminowych jest polielektrolitem kationowym. W celu określenia optymalnych warunków tworzenia układów polielektrolit-kompleks metaliczny wykonano pomiary potencjału zeta chitosanu w zależności od pH oraz siły jonowej badanych roztworów. Następnie w optymalnych warunkach pH strącano kompleksy polielektrolit-heteropolizwiązek. Do syntezy takich układów użyto następujących heteropolizwiązków: $H_3PW_{12}O_{40}$, $H_3PMo_{12}O_{40}$, $Co_3(PW_{12}O_{40})_2$, $HCoPW_{12}O_{40}$, $H_2Co_{0.5}PW_{12}O_{40}$, $Co_3(PMo_{12}O_{40})_2$, $HCoPMo_{12}O_{40}$ i $H_2Co_{0.5}PMo_{12}O_{40}$. Tak otrzymane układy polielektrolit-heteropolizwiązek zastosowano jako katalizatory reakcji utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym w podwyższonej temperaturze i ciśnieniu. Wszystkie zsyntezowane katalizatory były aktywne w badanej reakcji. Naniesienie soli kwasu fosforowolframowego HPW na chitosan powoduje obniżenie ich aktywności katalitycznej. W przypadku soli kobaltowych kwasu HPMo naniesienie na polielektrolit powoduje tylko nieznaczny spadek aktywności w porównaniu z nianiesionymi kompleksami.

15. Wpływ atomu centralnego (P, Si) oraz atomu addenda (W, Mo) w solach srebrowych heteropolikwasów o strukturze Keggina na bezpośredni rozkład tlenków azotu NO_x

Projekt badawczy N N204 1494 33 [2007-2010]

(kierownik projektu: dr Tadeusz Machej)

W ramach powyższego projektu w 2008 roku wykonano badania strukturalne soli srebrowych Ag₃PW₁₂O₄₀, Ag₃PMo₁₂O₄₀, Ag₄SiW₁₂O₄₀ oraz Ag₄SiMo₁₂O₄₀ metodą XRD i uściślanie ich parametrów metodą Rietvela. Wszystkie sole krystalizują w układzie regularnym w grupie Pn3m (224) z parametrem sieciowym $a \approx 11.9 \text{ \AA}$. Stwierdzono, że sól Ag₃PW₁₂O₄₀ tworzy unikalną strukturę, w której kation srebra nie zajmuje centralnej pozycji w luce oktaedrycznej pomiędzy anionami Keggina, natomiast tworzy dimery (Ag-Ag)⁺ powyżej 473 K. Podobnie w soli Ag₃PMo₁₂O₄₀ kationy srebrowe nie znajdują się w centrum przestrzeni między anionami Keggina. Analiza przeprowadzona dla soli Ag₄SiW₁₂O₄₀ wykazała, że sól ta ma silną tendencję do tworzenia struktury, w której występują tylko trzy kationy srebra, a pozostały ładunek jest kompensowany przez protony. Dlatego, możliwa jest do otrzymania tylko sól o składzie stechiometrycznym Ag₃HSiW₁₂O₄₀. Natomiast, analiza dyfraktogramu otrzymanego dla próbki Ag₄SiMo₁₂O₄₀ wykazała występowanie co najmniej 3 faz: Ag₃HSiMo₁₂O₄₀, MoO₃·0.55H₂O i AgNO₃ w ilościach odpowiednio 78, 20 i 2%. Występowanie fazy tritlenku molibdenu świadczy o częściowym rozkładzie anionów Keggina. We wszystkich badanych solach jony srebra są skoordynowane z jedną cząsteczką wody.

Analiza termogravimetryczna i kalorymetria skaningowa badanych soli srebrowych wykazała, że sole z fosforem jako atomem centralnym są trwałe do ok. 750 K, natomiast te z krzemem jako atomem centralnym do ok. 550 K. Jednakże, z powodu występowania wielu efektów endo- i egzotermicznych należy przeprowadzić dokładną analizę przejść fazowych przy użyciu wysokotemperaturowego XRD.

Określenie składu powierzchniowego otrzymanych soli srebrowych heteropolikwasów wykonano metodą spektroskopii XPS. We wszystkich solach stwierdzono występowanie srebra o energiach wiązania równych lub wyższych od Ag metalicznego od 368.0 do 369.6 eV (Tabela).

Próbki "as received"	Energie wiązań Ag3d _{5/2}			
Ag ₃ PW ₁₂ O ₄₀		367.0 eV (5.5 %)	368.5 eV (84.2 %)	369.5 eV (10.3 %)
Ag ₃ PMo ₁₂ O ₄₀	366.0 eV (5.1 %)		368.1 eV (79.1 %)	368.9 eV (15.8 %)
Ag ₄ SiW ₁₂ O ₄₀	366.0 eV (6.8 %)		368.0 eV (87.9 %)	369.3 eV (5.3 %)
Ag ₄ SiMo ₁₂ O ₄₀	366.0 eV (5.0 %)		368.2 eV (89.9 %)	369.6 eV (5.1 %)

Pomiary rezonansu magnetycznego ³¹P MAS NMR przeprowadzone dla heteropolikwasu H₃PW₁₂O₄₀ i jego soli srebrowej wykazały zmianę głównego piksu z -15.2 ppm na -14.7 ppm. Podobnie, dla soli Ag₃PMo₁₂O₄₀ zarejestrowano zmianę z -3.6 ppm na -2.7 ppm. Z kolei pomiary ²⁹Si MAS NMR przeprowadzone dla soli Ag₄SiW₁₂O₄₀ i Ag₄SiMo₁₂O₄₀ nie wykazały żadnych zmian w przesunięciu chemicznym po wprowadzeniu jonu srebra do właściwego heteropolikwasu. Wynosiły one -84.4 ppm oraz -74.4 ppm, odpowiednio.

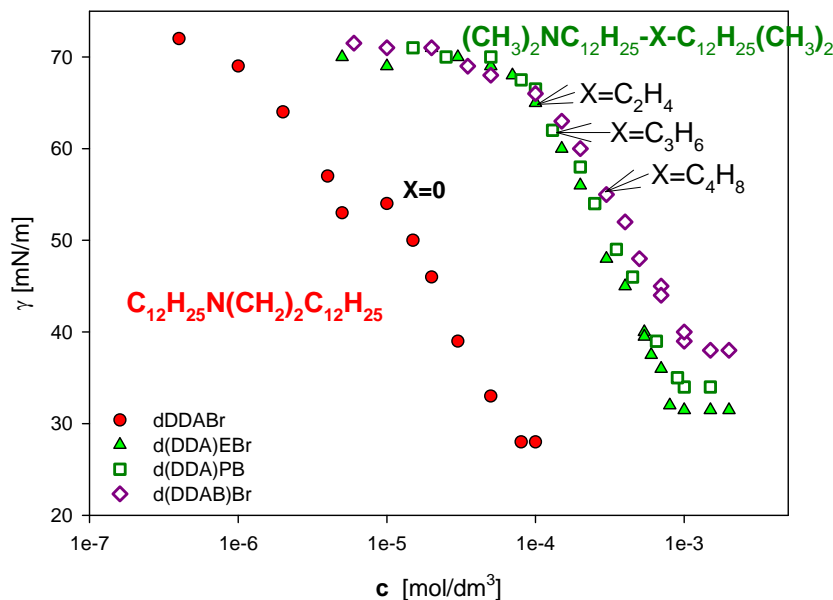
Przedstawione wyniki wskazują na potrzebę indywidualnego podejścia do struktur i ich własności dla każdej soli srebrowej heteropolikwasu.

16. 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)

Kationowe surfaktanty nowej generacji, typu czwartorzędowych soli amoniowych zawierających dwie lub więcej grup amoniowych budzą ostatnio duże zainteresowanie. W roku 2008 na drodze eksperymentalnej i teoretycznej przeanalizowaliśmy własności powierzchniowe wodnych roztworów nowo syntezowanych soli: bromku (bis-dodecylo-dimetylo-amoniowego (dDDABr), bromku tetrametylo-di-dodecylo-etylo-di-ammoniowego (d(DDA)EBr), bromku tetrametylo-di-dodecylo-1,3-propylo-di-ammoniowego (d(DDA)PBr), i bromku tetrametylo-di-dodecylo-butylo-di-ammoniowego (d(DDA)BBr). Dynamiczne napięcie powierzchniowe roztworów soli wieloamoniowych mierzono metodą analizy kształtu kropli w szerokim zakresie stężeń. Dla wszystkich wykonanych pomiarów kinetycznych wyznaczono równowagowe wartości napięcia powierzchniowego. O czystości badanych surfaktantów świadczył brak spadku napięcia powierzchniowego przy długim czasie pomiaru. Stwierdzono, że równowagowa izoterma napięcia powierzchniowego bromku (bis-dodecylo-dimetylo-amoniowego (dDDABr) położona jest w zakresie stężeń (10^{-7} - 10^{-4} M) tj. o jeden rząd wielkości niższym niż pozostałe izotermy surfaktantów diamoniowych zawierających łączniki „X” (od $X=C_2H_4$ do $X=C_4H_8$) pomiędzy grupami amoniowymi. Izotermy te praktycznie pokrywają się ze sobą niezależnie od długości łącznika alkilowego od $X=C_2H_4$ do $X=C_4H_8$, przyjmując jedynie różne wartości napięcia powierzchniowego w cmc. Efekt ten można wytłumaczyć zbyt małą różnicą w długości łącznika alkilowego i dominującym wpływem grup dodecyloowych na aktywność powierzchniową surfaktantu.



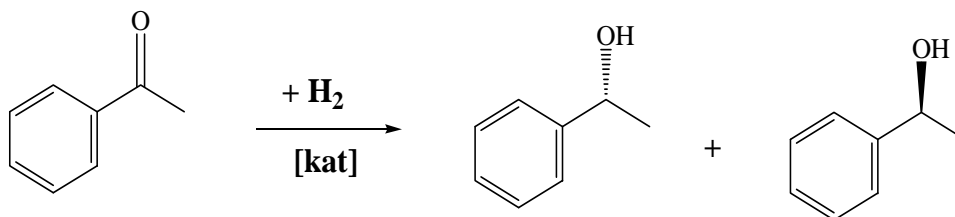
Rys.1. Zależność równowagowych wartości napięcia powierzchniowego od stężenia surfaktantu dla surfaktantów amoniowych różniących się długością alkilowego łącznika X pomiędzy grupami amoniowymi: dDDABr, d(DDA)EBr – $X=C_2H_4$, d(DDA)PBr – $X=C_3H_6$, d(DDA)BBr – $X=C_4H_8$,

17. Badanie heterogenizowanych chiralnych kompleksów rutenu w katalitycznym enancjoselektywnym uwodornieniu ketonów

Projekt badawczy N N204 249034

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

Celem projektu jest synteza i zastosowanie chiralnych kompleksów rutenu zawierających ligandy typu DuPhos oraz TMBA w katalitycznym uwodornieniu wybranych ketonów zgodnie z poniższym schematem:



2-rzędowe chiralne alkohole są ważnymi technologicznie reagentami, półproduktami stosowanymi głównie w przemyśle farmaceutycznym przy produkcji leków bądź związków biologicznie czynnych.

Obecnie opracowywana jest metoda uwodorniania acetofenonu w obecności kompleksu $[(\eta^5\text{-MeC}_5\text{H}_4)\text{Ru}(\eta^3\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)(\eta^1\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)]^+$ osadzonego na nośnikach typu HMS, SBA, MCM i FSM. Prowadzona jest także ww. reakcja uwodornienia w obecności metalicznego rutenu osadzonego na matrycach polimerowych.

18. Fotokatalityczny rozkład wody poza atmosferą Ziemi. Przykład wykorzystania katalizy w misjach badania Układu Słonecznego

Projekt badawczy N N204 217734 [2008-2009]

(kierownik projektu: dr Robert Gryboś)

Rozkład wody jest jednym z najważniejszych procesów w przyszłej bazie księżycowej. Reakcja ta jest w stanie zapewnić tlen dla systemów podtrzymywania życia a także mieszanke wodorowo-tlenową do wykorzystania jako paliwo raketowe. Chociaż obecność wody na Księżycu jest do tej pory niepotwierdzona, transport wody jest nieporównanie łatwiejszy i bezpieczniejszy niż transport wodoru i tlenu. Obecnie jako metodę dysocjacji wody rozważa się jedynie elektrolizę zasilaną ogniwami słonecznymi. Fotokataliza jest niezwykle obiecującą alternatywą, tym bardziej, że powierzchnia Księżycy obfituje w ditlenek tytanu (IV), który jest bardzo efektywnym katalizatorem rozkładu wody. Użycie gleby księżycowej jako katalizatora byłoby idealnym wdrożeniem idei ISRU (wykorzystania lokalnych zasobów). Ponieważ powierzchnia Księżycy otrzymuje pełen zakres promieniowania słonecznego, nie ma potrzeby dostosowywania katalizatora to jakiegoś konkretnego okna w pasmie elektromagnetycznym. Z drugiej strony, ekstremalne warunki panujące na powierzchni Księżycy (niska temperatura i ciśnienie) stawiają zupełnie nowe wymagania wobec katalizatora.

Wybrano cztery układy do przetestowania jako katalizatory fotodysocjacji:

anataz – bardzo wydajny ziemski katalizator do fotodysocjacji wody, niestety nie występuje na Księżycu.

rutyl – znacząco mniej aktywny niż anataz ale obecny w glebie księżycowej

ilmenit (FeTiO_3) – minerał księżycowy, znajdujący także na Ziemi, posiada pewne właściwości fotokatalityczne

armalcolit ($[\text{Mg,Fe}]\text{Ti}_2\text{O}_5$) – nowy minerał odkryty w trakcie misji Apollo o nieznanym aktywności fotokatalitycznej.

Przeprowadzono obliczenia teoretyczne używając periodycznej metody DFT (program VASP) z hybrydowym funkcjonałem HSE0. Funkcjonały hybrydowe są zaprojektowane aby poprawnie odtwarzać szerokość przerwy wzbronionej, którą metoda DFT systematycznie zaniża. Porównanie wyników dla dwóch funkcjonałów oraz eksperymentu przedstawia poniższa tabela.

Katalizator	GGA	HSE0	Dośw.
Anataz	2.0	3.2	3.2
Rutyl	1.7	2.8	3.0
Ilmenit	2.1	2.6	2.6
Armalcolit	1.2	2.7	---

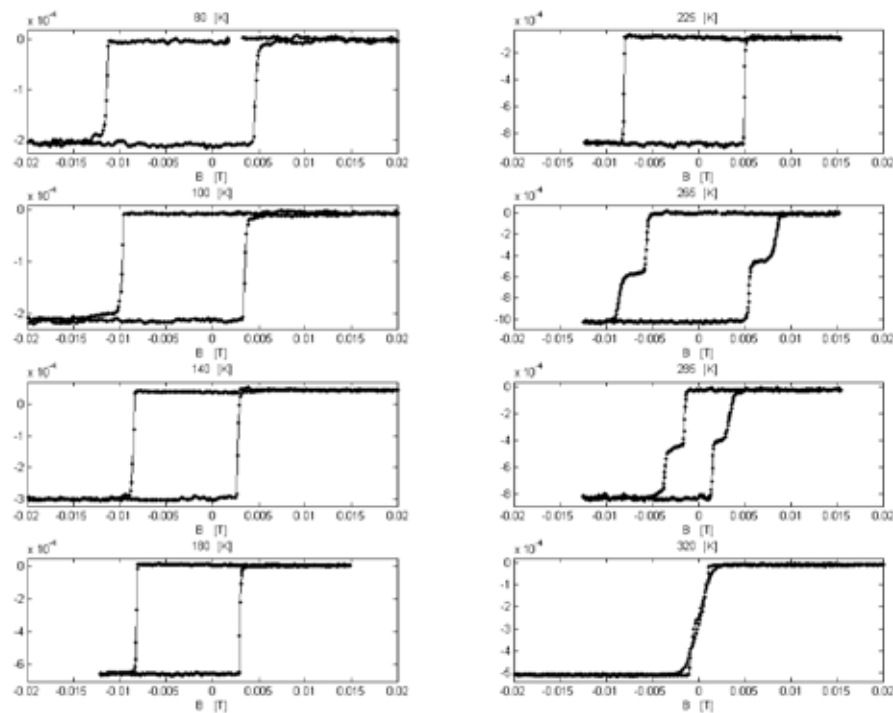
19. Oddziaływanie wymienne typu "exchange-bias" w układach epitaksjalnie osadzanych metali 3d i 4f na polarnych i nie-polarnych podłożach tlenków metali przejściowych

Projekt badawczy N N202 248535 [2008-2011]
(kierownik projektu: dr Jacek Gurgu)

Niniejszy projekt badawczy rozpoczął się 23 września 2008 roku tj. w dniu podpisania umowy z MNiSW. Zgodnie z kosztorysem grantu, w pierwszej kolejności dokonano zakupu źródła emisji par EBV40A1 z dwoma zasilaczami EBV40A-PS.

Po dokonaniu przeglądu literaturowego do pierwszych eksperymentów wybrano układ tlenku kobaltu CoO na monokrystalicznym podłożu MgO(100). Przeprowadzono szereg eksperymentów polegających na reaktywnym nanoszeniu kobaltu w atmosferze tlenu cząsteczkowego na podłoże MgO(100). Podczas procesu naporowywania zmieniano ciśnienie parcjalne tlenu, temperaturę podłoża oraz tempo nanoszenia warstw. Wykonano pomiary LEED oraz AES na w/w układzie w celu doboru optymalnych warunków epitaksjalnego wzrostu CoO/MgO(100). Ponieważ podczas reaktywnego naporowywania kobaltu istnieje duże prawdopodobieństwo pojawienia się na powierzchni niepożądanego spinelu Co_3O_4 , dodatkowo wykonano pomiary rentgenowskie pozwalające określić skład fazowy badanego układu. Docelowo planuje się uzyskanie układu Fe/CoO/MgO(100), który będzie charakteryzował się występowaniem oddziaływania wymiennego typu „exchange bias”.

Niemal równocześnie przystąpiono do uzyskania analogicznego układu jak w/w o składzie CoO/Fe/MgO(100). Wstępne wyniki badań magnetycznych wykonanych przy użyciu techniki MOKE zaprezentowano poniżej. Doskonale widoczne jest asymetryczne przesunięcie pętli histerezy względem osi remanencji, co jest równoznaczne z pojawieniem się pola H_{EB} . Wydaje się, że porównanie własności magnetycznych obu układów może dostarczyć ciekawych wniosków.



PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE

1. Nowe metody syntezy kryształów zeolitów typu MFI, FAU i BEA z multimodalnym systemem porów i ich wykorzystanie jako nowe nanomateriały dla procesów katalitycznych

Projekt badawczy promotorki N204 162 31/3659 [2006-2008]

(promotor: doc Mirosław Derewiński, doktorant: mgr Anita Burkat-Dulak)

Opracowano metodę preparatyki kryształów zeolitów wysokokrzemowych, posiadających system izolowanych mezo-/makroporów. Modyfikacja kryształów następuje w trakcie hydrotermalnej syntezy sita molekularnego prowadzonej w obecności mezo-/makromatryc, tj. mono- i poldispersyjnych zawiesin cząstek węgla lub anionowego lateksu polistyrenowego. Usunięcie, w wyniku posyntezy obróbki termicznej, zaokludowanych cząstek prowadzi do wygenerowania w strukturze pojedynczego kryształu wolnych mezo-/makroporów. Modyfikacja ta nie powoduje zmian składu chemicznego zeolitu, a dobór odpowiedniej matrycy pozwala na modelowanie wielkości, kształtu oraz ilości powstających porów. Analiza mikroskopowa TEM, bezpośrednio potwierdziła obecność porów w zsyntezowanych kryształach. Otrzymane preparaty zostały wykorzystane jako aktywne nośniki do osadzenia fazy aktywnej o właściwościach redoksowych i zastosowane jako nowe katalizatory bifunkcyjne.

Wykazano, że zeolity typu MFI posiadające kryształy z wygenerowanym systemem pustych mezo-/makroporów mogą być użyte do osadzenia wysokozdystrybuowanej fazy metalicznej (Pd). Wielkość klasterów osadzonych wewnątrz mezo-/makroporów jest znacznie mniejsza niż wielkość cząstek palladu zlokalizowanych na powierzchni zewnętrznej kryształów. Dodatkowo, duża ilość Pd obecna w wolnych przestrzeniach wewnątrz kryształów zmniejsza ilość metalu, która zostaje osadzona na powierzchni zewnętrznej.

Wyniki badań hydroizomeryzacji n-oktanu wykazały, że obecność izolowanych mezo-/makroporów w kryształach zeolitu prowadzi do wzrostu aktywności katalizatora Pd/HZSM-5_{mod}. Lepsza dystrybucja klasterów metalu, zaokludowanych w mezo-/makroporach, oraz brak możliwości ich migracji i spiekania w większe ugrupowania odpowiada za obserwowany efekt. Dodatkowo, przeprowadzone testy wykazały większą odporność katalizatorów Pd/HZSM-5_{mod} na zatrucie związkami siarki obecnymi w środowisku reakcji.

Nieutleniająca dehydroaromatyzacja metanu (MDA) może stać się w przyszłości alternatywą dla dotychczasowych, opartych na przerobieniu ropy naftowej, procesów produkcji węglowodorów aromatycznych (głównie benzenu) oraz wodoru. Obiecującym katalizatorem procesu MDA, jest dwufunkcyjny układ MoC_x/HZSM-5, wykorzystujący jako silnie kwasowy nośnik zeolit typu ZSM-5. W katalizatorze tym, karbidki i oksykarbidki molibdenu powstające podczas nawęglania prekursora MoO₃ osadzonego na powierzchni kryształów zeolitu, stanowią fazę aktywną, na której zachodzi aktywacja cząsteczki metanu i jej sprzężenie do węglowodoru C₂ (głównie etylenu). Dalsza przemiana powstałej olefiny C₂ do aromatów (poprzez oligomeryzację, cyklizację oraz przeniesienie wodoru) biegnie na silnych centrach protonowych nośnika zeolitowego. Wadą procesu jest odkładanie się depozytu węglowego, które prowadzi do szybkiego spadku aktywności katalizatora.

Badania aktywności katalizatorów MoC_x/HZSM-5_{mod}, w których wykorzystano kryształy zeolitu zawierające wtórny system mezo-/makroporów, wykazały znaczny wzrost czasu życia tych katalizatorów. W oparciu o przeprowadzone testy udowodniono, że wygenerowane wewnątrz kryształów zeolitu komory stanowią „pułapki”, w których zachodzi odkładanie depozytu węglowego (koks). W konsekwencji, prowadzi to do zmniejszenia dezaktywacji centrów kwasowych znajdujących się w kanałach sita, na których biegnie proces aromatyzacji olefiny powstałej w pierwszym etapie procesu.

2. Układy multimodalne o podwyższonych właściwościach kwasowych jako podstawa nowych układów katalitycznych

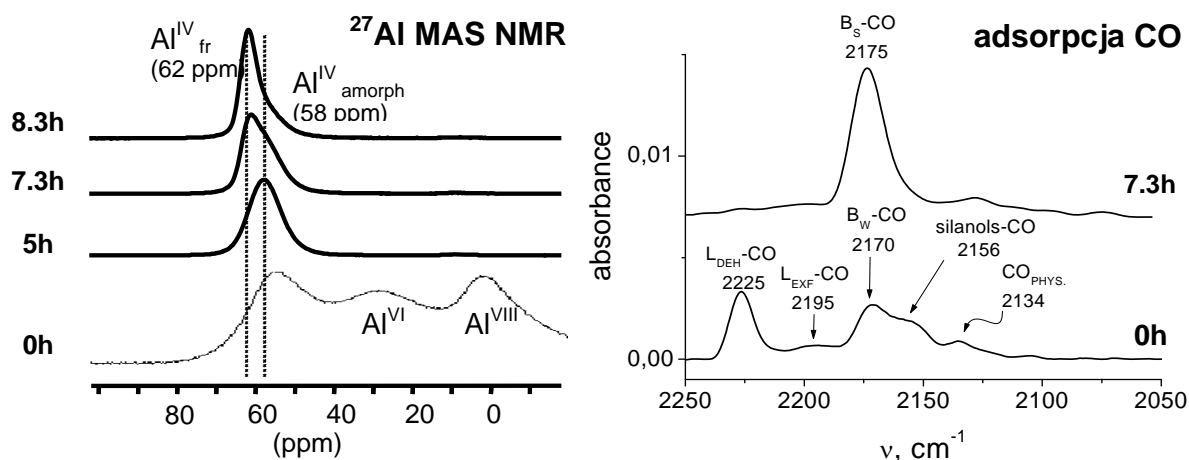
Projekt badawczy promotorki N205 048 31/2120 [2006-2008]

(promotor: doc Mirosław Derewinski, doktorant: mgr Veronika Pashkova)

Wykorzystanie zeolitów w procesach katalitycznych jest często ograniczone ze względu na trudności w transporcie cząsteczek reagentów przez wąskie kanały sita molekularnego. Częściowa rekrytalizacja nieuporządkowanych materiałów mezo-/makroporowatych w układy zawierające nanodomeny zeolitowe rozproszone w amorficznej matrycy jest jedną z metod zwiększenia dostępności centrów aktywnych dla reagujących cząsteczek. Celem podjętych prac były badania procesu transformacji wyjściowych, porowatych materiałów amorficznych o różnym składzie chemicznym, w materiały kompozytowe zawierające rozproszone nanodomeny zeolitów typu FAU i BEA, monitorowanie procesu tworzenia nowych centrów aktywnych jak i określenie ich populacji, natury i mocy kwasowej.

Strukturalna reorganizacja amorficznych glinokrzemianów w trakcie ich rekrytalizacji prowadzi do zmian w koordynacji oraz lokalizacji sieciowych atomów glinu. Spektroskopia ^{27}Al MAS NMR została wykorzystana do kontroli procesu tworzenia krystalicznych nanodomen mikroporowatych oraz śledzenia zmian stanu atomów Al. Przeprowadzone badania rekrytalizowanych materiałów wykazały obecność tetraderycznie skoordynowanych atomów glinu w otoczeniu typowym dla struktur zeolitowych, oraz zanik w widmach linii rezonansowych glinu penta- i oktaedrycznego, typowych dla struktur amorficznych (Rys. 1).

Właściwości kwasowe nowych materiałów określono w oparciu o wyniki sorpcji tlenu węgla oraz pirydyny, monitorowanych metodą spektroskopii w podczerwieni. Niezależnie od różnej kwasowości wyjściowych glinokrzemianów, widma IR tlenu węgla zaadsorbowanego na materiałach zawierających nanodomeny o strukturze FAU czy BEA, posiadają pasmo drgań CO związanego z silnymi centrami protonowymi typu Si-(OH)-Al (pasmo 2175 cm^{-1}) (Rys.2). Moc kwasowa nowych centrów protonowych jest wyższa aniżeli moc odpowiednich centrów występujących w materiałach wyjściowych. Obecność nowych mostkowych grup Si-(OH)-Al będących nośnikiem silnych właściwości kwasowych potwierdziła analiza widma IR w obszarze drgań walencyjnych grup hydroksylowych. Ilościowe badania sorpcji pirydyny wykazały, że stężenie silnych centrów typu Brønsteda, jak również ich moc kwasowa, rosną wraz ze wzrostem stopnia rekrytalizacji wyjściowych materiałów mezo-/makroporowatych w nowe układy multimodalne.



Rys. 1. Widma ^{27}Al MAS NMR oraz FT IR (adsorpcja CO) otrzymane dla wyjściowego glinokrzemianu (0 godz) oraz kompozytu zawierającego nanodomeny zeolitu FAU (5, 7.3 i 8.3godz)

3. Badanie właściwości centrów Cu(I) w zeolitach typu fozajytu i MFI i ich oddziaływań z cząsteczkami metodami chemii kwantowej i metodami hybrydowymi

Projekt badawczy promotorski N204 180 31/3999 [2006-2008]
(promotor: prof. Ewa Broclawik, doktorant: mgr Paweł Rejmak)

W niniejszej pracy zawarto wyniki teoretycznych badań nad właściwościami strukturalnymi, energetycznymi i elektronowymi centrów Cu(I) w zeolitach typu fozajytu (FAU) i MFI oraz adsorpcji cząsteczek NO na tych centrach. Dla kompleksów mono- i dinitrozylowych przeprowadzono dodatkowo analizę wibracyjną. Większość wyników została otrzymana przy użyciu hybrydowych metod QM/MM, pozwalających uzyskać dużą wiarygodność wyników teoretycznych przy niewielkim czasie obliczeń. Zeolity zawierające centra Cu(I) są znane z aktywności katalitycznej w procesach rozkładu tlenków azotu (deNO_x) i syntezie diwęglanu metylu (czynnik metylujący w przemyśle chemicznym i komponent paliw), układy te były też proponowane jako selektywne adsorbenty do oczyszczania paliw ze związków siarki. Charakteryzacja zeolitów metodami eksperymentalnymi, zwłaszcza spektroskopowymi, napotyka wiele trudności i często prowadzi do niejednoznacznych wyników, dlatego modelowanie teoretyczne okazuje się być bardzo pomocne w nauce o zeolitach.

Do oryginalnych osiągnięć autora należy zaliczyć skonstruowanie i systematyczne zbadania modeli QM/MM wszystkich trzech typów centrów Cu(I) w FAU, uwzględnienie wpływu różnych dystrybucji atomów glinu na właściwości centrów Cu(I), zbadanie właściwości adsorpcyjnych kompleksów mononitrozylowych, jak również kilku typów kompleksów dinitrozylowych na tychże centrach, wreszcie propozycja wyjaśnienia eksperymentalnych widm IR dla tych układów. Również modelowanie kompleksów dinitrozylowych w zeolicie MFI metodami QM/MM należy do nowych osiągnięć. Stwierdzono, że energie tworzenie kompleksu mononitrozylowego silnie zależą od stabilności centrum Cu(I) i relaksacji wskutek adsorpcji NO, natomiast energie adsorpcji drugiej cząsteczki NO są zbliżone dla wszystkich badanych układów. Można stwierdzić, że adsorpcja pierwszej cząsteczki NO jest jednym z czynników determinujących przebieg procesów deNO_x i może być odpowiedzialna za różnice we właściwościach FAU i MFI. Różnice w energiach adsorpcji zależą głównie od typu centrów, natomiast w mniejszym stopniu od ilości atomów Al w otoczeniu centrum Cu(I). Natomiast pasma rozciągające NO w podczerwieni mogą wykazywać wrażliwość na różnice w lokalnej dystrybucji atomów Al. Analogiczne wyniki dla adsorpcji CO i położenia pasm w podczerwieni dla kompleksów monokarbonylowych uzyskano w ramach pracy doktorskiej przed rozpoczęciem realizacji grantu.

Otrzymane wyniki mogą być pomocne w jakościowej interpretacji widm podczerwieni innych cząsteczek zaadsorbowanych na centrach Cu(I) w FAU i MFI, a rozważania dotyczące energetyki adsorpcji NO i CO na tych systemach mogą być pomocne w bardziej racjonalnym projektowaniu katalizatorów i adsorbentów zeolitowych wymienionych jonami Cu(I).

4. Określenie czynników determinujących powstawanie kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych

Projekt badawczy promotorski N204 012 31/0279 [2006-2008]

(promotor: prof. Kazimierz Małyś, doktorant: mgr Jan Zawala)

Celem projektu było określenie czynników wpływających na stabilność ciekłych filmów ciekłych oraz powstawanie kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe przy zderzeniu pęcherzyka z powierzchnią międzyfazową. W okresie sprawozdawczym badano wpływ ładunku elektrycznego na granicy ciecz/gaz oraz ciecz/ciało stałe na stabilność filmów zwilżających utworzonych podczas kolizji pęcherzyka gazu z różnymi powierzchniami międzyfazowymi. Na stabilność filmów (zarówno pianowych jak i zwilżających) wpływa wiele czynników, z których najistotniejszymi są obecność substancji powierzchniowo aktywnych (rodzaj i stężenie), stan warstwy adsorpcyjnej, rodzaj i właściwości powierzchni międzyfazowej, energia kinetyczna pęcherzyka, siła jonowa i pH roztworu, ładunek elektryczny powierzchni międzyfazowych tworzących film.

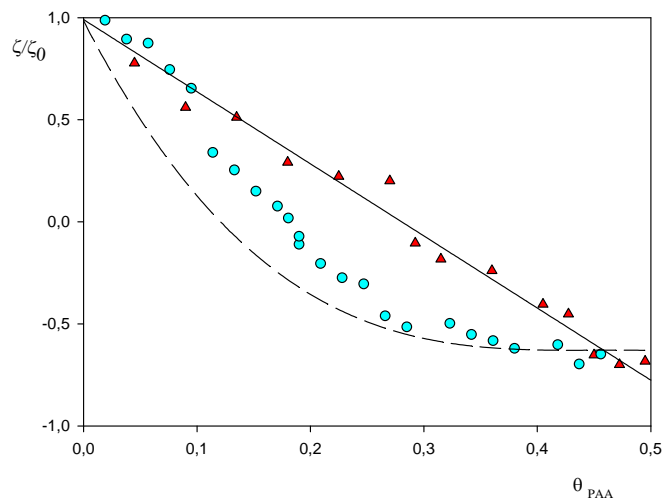
Wykonano badania wpływu ładunku elektrycznego na stabilność filmów zwilżających oraz czas utworzenia kontaktu trójfazowego na powierzchniach miki oraz fluorytu. Powierzchnie te wybrano ze względu na to, że zgodnie z danymi literaturowymi, były bardzo dobrze zdefiniowane pod względem ich powierzchniowego ładunku elektrycznego. Zgodnie z danymi literaturowymi fluoryt posiada punkt izoelektryczny w granicach pH 9-10 natomiast powierzchnia miki pozostaje ujemna praktycznie w całym zakresie pH. Ładunek powierzchni międzyfazowych tworzących film modyfikowano używając czynników modyfikujących, zależnych od rodzaju powierzchni. Dla powierzchni ciecz/gaz (powierzchnia pęcherzyka) były to: (i) zmiana pH roztworu, (ii) adsorpcja jonowych surfaktantów oraz (iii) kontrola stanu dynamicznej warstwy adsorpcyjnej powstającej na powierzchni unoszącego się pęcherzyka. Dla granicy międzyfazowej ciecz/ciało stałe w celu modyfikacji ładunku powierzchniowego stosowano zmiany pH roztworu. Badania wykazały istotny wpływ ładunku elektrycznego na stabilność filmów zwilżających powstałych w warunkach dynamicznych. Zarówno dla powierzchni fluorytu jak i miki utworzony film zwilżających nie pękał i był stabilny zawsze wtedy, gdy obie powierzchnie międzyfazowe tworzące film był naładowane jednoimennie. Oznacza to, iż powstały ciekły film wyciekał do grubości, przy której następowało nakładanie się elektrycznych warstw podwójnych zgromadzonych na powierzchniach międzyfazowych i nie pękał, gdyż był stabilizowany odpychającymi oddziaływaniami elektrostatycznymi. Kiedy odpowiednio dobrane warunki eksperymentalne (pH, obecność jonowego surfaktantu) spowodowały, że powierzchnie międzyfazowe tworzące film zwilżający posiadały przeciwny znak ładunku elektrycznego wtedy powstały film był destabilizowany przyciągającymi siłami elektrostatycznymi i obserwowano utworzenie kontaktu trójfazowego. A zatem siły elektrostatyczne decydowały o stabilności filmów zwilżających na powierzchniach miki i fluorytu.

5. Określenie wpływu zaadsorbowanych polielektrolitów na kinetykę osadzania i topologię monowarstw cząstek

Projekt badawczy promotorski N 204 150 32/3822[2007-2009]

(promotor: prof. Zbigniew Adamczyk, doktorant: mgr Anna Bratek-Skicki)

Wyznaczono doświadczalnie charakterystyki polielektrolitów: kwasu poliakrylowego o ciężarze cząsteczkowym 12 000 (PAA12) oraz 70 000 (PAA70), a także polietylenoiminy (PEI) o ciężarze cząsteczkowym 75 000, obejmujące współczynnik dyfuzji (promień hydrodynamiczny), ruchliwość elektroforetyczną, potencjał zeta, punkt izoelektryczny oraz lepkość dynamiczną. Parametry te zostały wykorzystane do interpretacji wyników doświadczalnych, dotyczących adsorpcji polielektrolitów na granicy faz mika/roztwór elektrolitu. Pomiary adsorpcji były prowadzone przy użyciu precyzyjnej metody potencjału przepływu, w kanale płasko-równoległym. Wytworzone w ten sposób biwarstwy PEI/PAA były używane w dalszych etapach badań jako efektywne substraty dla osadzania cząstek koloidalnych. Wyniki tych pomiarów przedstawiono na Rys. 1 w formie zależności zredukowanego potencjału zeta biwarstwy polielektrolitu ζ/ζ_0 od stopnia pokrycia PAA, oznaczanego jako θ_{PAA} . Jak można zauważyć na Rys. 1, wyniki doświadczalne uzyskane dla PAA12 dają się dobrze opisać krzywą teoretyczną wynikającą z modelu Gouy'a-Chapmana, który został sformułowany przy założeniu dwuwymiarowej adsorpcji płaskich cząsteczek. Tak więc, uzyskane wyniki przedstawione na Rys. 1 wskazują, że małowcząsteczkowy PAA12 adsorbował się w postaci dwuwymiarowej, nie tworząc pętli lub innych struktur trójwymiarowych. Z kolei, w przypadku wysokocząsteczkowego PAA70, zależność ζ/ζ_0 od stopnia pokrycia jest lepiej opisywana naszym modelem teoretycznym (krzywa przerywana na Rys. 1), który postuluje trójwymiarową adsorpcję molekuł polielektrolitu w postaci izolowanych cząstek. Można więc wyciągnąć wniosek, że adsorpcja PAA70 była w istocie trójwymiarowa, co można interpretować znacznie większymi rozmiarami cząsteczek PAA70, umożliwiającymi tworzenie pętli i podobnych struktur.



Rys. 1. Zależność zredukowanego potencjału zeta biwarstwy: PEI/PAA na micy od pokrycia PAA, θ_{PAA} . Trójkąty oznaczają wyniki doświadczalne uzyskane dla PAA12, natomiast kółka pokazują wyniki dla PAA70. Linia ciągła przedstawia model Gouy-Chapmana, a linia przerywana wyniki teoretyczne obliczone z własnego modelu, postulującego trójwymiarową adsorpcję polielektrolitów.

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

Projekt badawczy promotorski N N204 214533 [2007-2009]

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

Modyfikacja powierzchni metalicznych przez adsorpcję nano- i mikrokapsulek ma istotne znaczenia w zastosowaniach biomedycznych (np. implanty kostne, stenty pokryte kapsułkami zawierającymi leki proliferacyjne) i zabezpieczeniach przeciw korozji. W związku z tym celem projektu jest badanie osadzania modelowych mikrokapsulek na gołych powierzchniach metalicznych i powierzchniach modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitowych (PEM). PEM są często używane do zmian właściwości powierzchni i jako promotor adhezji.

W ramach założonych zadań wynikających z planu na rok 2008 wykonane zostały następujące prace:

- preparatyka mikrokapsulek metodą Layer-by-Layer
- wyznaczenie kinetyki osadzania mikrokapsulek na powierzchniach homogenicznych i powierzchniach modyfikowanych przez adsorpcję polielektrolitów.

Przygotowane zostały kapsułki zbudowane z rdzenia (cząstki lateksu polistyrenowego o rozmiarach ok. 1 μ m) oraz powłoki polielektrolitowej (składającej się z polikationu PAH - polialliloamina i polianionu PSS - polisulfonian styrenowy) o określonej ilości warstw. Adsorpcja polielektrolitów na cząstkach monitorowana była przez pomiar ruchliwości elektroforetycznej. Wartość potencjału zeta zmienia się oscylacyjnie wraz z ilością warstw powłoki kapsułki i jest równa ok. +50 mV dla warstw polikationowych i -50 mV dla warstw polianionowych. Kapsułki charakteryzują się monodispersyjnością i stabilnością w czasie.

Pomiary doświadczalne osadzania mikrokapsulek prowadzone były w oparciu o bezpośrednie obserwacje mikroskopowe *in situ* przy użyciu celki OIJ (oblique impinging jet). Wyznaczono kinetyki osadzania mikrokapsulek na powierzchniach jednorodnych (mika, krzem), na powierzchniach jednorodnych modyfikowanych przez adsorpcję filmów wielowarstwowych oraz na powierzchniach heterogenicznych – stali chirurgicznej, czystych i modyfikowanych. Stwierdzono, że modelowe mikrokapsułki z ostatnią warstwą polianionu osadzają się na powierzchni homogenicznej o dodatnim ładunku powierzchniowym zgodnie z mechanizmem bezbarierowym, a kinetyka osadzania jest zgodna z wyznaczoną na podstawie teorii dyfuzyjno-konwekcyjnego transportu cząstek do powierzchni. Również kapsułki zakończone polikationem osadzają się na powierzchniach naładowanych ujemnie, a kinetyka procesu osadzania jest określona przez transport do powierzchni. To oznacza, że osadzanie kapsulek na powierzchni zależy od ładunku tej powierzchni oraz ładunku zewnętrznej warstwy powłoki kapsułki i nie zależy od ilości warstw polielektrolitowych powłoki kapsułki ani jej grubości. Duży rozrzut otrzymanych wyników dla kinetyki osadzania lateksu polistyrenowego na gołej powierzchni stali świadczy o jej heterogeniczności. Na podstawie pomiarów kinetyki osadzania mikrokapsulek na powierzchni stali i stali modyfikowanej filmami polielektrolitowymi stwierdzono, że maksymalne pokrycie dla gołej stali wynosi ok. 45% cząstkami ujemnymi i 12% cząstkami dodatnimi, a na powierzchniach modyfikowanych jest równe ok. 45%. Kinetyka osadzania kapsulek (PAH/PSS)₄PAH na stali modyfikowanej wielowarstwowym filmem (PAH/PSS)₆ jest praktycznie identyczna jak kinetyka osadzania kapsulek (PAH/PSS)₅ na stali modyfikowanej (PAH/PSS)₅PAH. Obie kinetyki zgodne są z dyfuzyjno-konwekcyjnym modelem transportu.

7. Transformacje węglowodorów terpenowych na katalizatorach zeolitowych

Projekt badawczy promotorski nr N N204 1240 33 [2007-2009]

(promotor: prof. Bogdan Sulikowski, doktorant: mgr Łukasz Mokrzycki)

Celem pracy było zbadanie wpływu procesu usuwania krzemu z wybranych zeolitów na strukturę otrzymanego glinokrzemianu, jego system porów i właściwości kwasowe. Zmodyfikowane zeolity były następnie charakteryzowane pod względem fizykochemicznym i katalitycznym. Proces usuwania krzemu prowadzono zarówno pod ciśnieniem atmosferycznym, jak i w warunkach hydrotermalnych. Warunki hydrotermalne zostały również wykorzystane do syntezy układów hybrydowych typu zeolit-materiał mezoporowaty. Zeolit MCM-22 został dodatkowo zmodyfikowany na drodze delaminacji. Jako wyjściowe materiały posłużyły zeolity: komercyjny ZSM-5 z firmy Zeolyst, oraz zeolity typu ZSM-12 i MCM-22 pochodzące z syntez własnych. Wspólną cechą wybranych zeolitów jest ich moduł krzemowy, tj. Si/Al=40.

Zeolity ZSM-12, MCM-22 i ZSM-5 zostały zmodyfikowane metodą częściowego usuwania krzemu z ich struktury za pomocą roztworów wodorotlenku sodu o stężeniu zmienianym w granicach 0,05 - 1,0 M, w zakresie temperatur 65-100°C. Po raz pierwszy do prowadzenia tego procesu zastosowano warunki hydrotermalne, czyli modyfikację w autoklawach pod zwiększonym ciśnieniem i temperaturze 100°C. W wyniku tak prowadzonych modyfikacji uzyskano łącznie 40 matryc zeolitowych: 16 na bazie zeolitu ZSM-12, 8 na bazie zeolitu MCM-22 i 16 na bazie zeolitu ZSM-5. Wszystkie otrzymane próbki zostały scharakteryzowane przy użyciu dyfrakcji rentgenowskiej, sorpcji azotu, NMR oraz mikroskopii SEM.

Dane uzyskane techniką XRD ujawniły wyraźny wpływ zastosowanej modyfikacji na strukturę materiałów, jak i ich odmienne zachowanie się. W oparciu o nie opracowano mapy zmian krystaliczności podczas prowadzenia procesu usuwania krzemu. Zeolity ZSM-5 oraz ZSM-12 wykazały bardzo podobne zachowanie - w ich przypadku charakterystyczna struktura MFI i MTW została zachowana w całym zakresie stężeń stosowanego roztworu NaOH, temperatur i warunków. Natomiast zeolit MCM-22 był bardziej wrażliwy na warunki modyfikacji - charakterystyczna struktura MWW została zniszczona przy zastosowaniu roztworów wodorotlenku sodu o wyższym stężeniu (0,5 i 1,0 M). Mikrofotografie SEM ujawniły różną morfologię badanych zeolitów, co tłumaczyło właśnie takie zachowanie się w czasie procesu usuwania krzemu. Obserwowana płytkowa morfologia preparatu MCM-22 była powodem jego zwiększonej wrażliwości na parametry tego procesu. Równie wyraźny jest wpływ zastosowanej modyfikacji na strukturę porowatą zeolitów. Zarówno temperatura procesu desilikacji, jak i stężenie NaOH prowadziła do zmiany udziału ilości mezoporów w strukturze, jednak wpływ temperatury jest mniej widoczny. Pomiarzy ^{29}Si NMR i ^{27}Al MAS NMR dostarczyły dowodów na obecność procesów dealuminiowania i/lub realuminiowania, co potwierdzono niezależnie metodami XPS i EDX.

Otrzymane modyfikowane katalizatory zeolitowe testowano w reakcji izomeryzacji α -pinenu, w fazie ciekłej, w zakresie temperatur 45-90 °C, dokumentując wpływ struktury zeolitu, jego systemu porów i kwasowości na przebieg reakcji katalitycznej.

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

Projekt badawczy promotorski N N205 018934 [2008-2010]

(promotor: prof. Jerzy Haber, doktorant: mgr inż. R. Karcz)

Fenol wykorzystywany jest do syntezy bifenyli, żywic fenolanowych, kaprolaktamu, aniliny i alkilofenyli. Używa się go także do produkcji leków i pestycydów. Reakcje utleniania fenoli prowadzące do odpowiednich chinonów są ważnymi procesami biochemicznymi. Wiele naturalnych chinonów jest aktywnych w ważnych procesach biologicznych. Z drugiej strony istnieje potrzeba usuwania zanieczyszczeń fenolowych z środowiska naturalnego. Z punktu widzenia katalizy najbardziej interesującą reakcją fenoli jest selektywne utlenianie. Reakcja ta prowadzi do otrzymania odpowiedniego chinonu lub bifenyli. W literaturze można znaleźć wiele prób użycia różnych metalokompleksów jako katalizatorów tych reakcji. Głównym czynnikiem limitującym zastosowanie tych materiałów jest ich deaktywacja wskutek utlenienia ligandu organicznego. Hill i wsp. zaproponowali sposób ominięcia tego ograniczenia poprzez użycie lakunarnych anionów Keggina, które nie ulegają rozkładowi. Pokazano, że metalokompleksy są aktywne w tej reakcji, oraz że wzrost temperatury reakcji zmienia selektywność reakcji – w niskich temperaturach, tj. 30°C produktami są chinony, a w wyższych (80°C) bifenyli. Właściwości heteropolizwiązków mogą być modyfikowane poprzez wymianę atomu centralnego, atomu addenda, kationów kompensujących, tworzenie anionów lakunarnych i wprowadzanie do nich kationów metalu przejściowego. Celem pracy jest wyjaśnienie, jaki jest wpływ tych czynników na aktywność katalizatora.

Katalizatory przygotowano metodą opisaną wcześniej przez Hilla i wsp. Katalizatory zawierały kationy Fe, Mn i Co w pozycji adenda. Otrzymane aniony strącono w postaci soli potasowych i tetrabutylamoniumowych. Kationy organiczne zostały wprowadzone celem poprawienia rozpuszczalności katalizatora w rozpuszczalnikach organicznych. Otrzymane katalizatory zostały scharakteryzowane przy pomocy metod FT-IR, UV-Vis, DSC-TG oraz XRD. Właściwości utleniające katalizatora zbadano w reakcji utleniania fenolu w fazie ciekłej. Fenol (0,3 mmol) i katalizator rozpuszczono w acetonitrylu, a następnie do roztworu dodano dwuoctan jodozobenzenu (DIB). Reakcje prowadzono w zakresie temperatur od 0°C do 60°C. Głównym produktem reakcji był 1,4-benzochinon. Przeprowadzono dwa testy bez katalizatora. W pierwszym z nich fenol reagował z DIB i produktem reakcji był p-jodofenyleter, a w drugim 1,4-hydrochinon reagował z DIB do 1,4-benzochinonu z wydajnością około 100%. Stąd postulujemy, że organiczne sole heteropolizwiązków użyte jako katalizatory kierują reakcję ze ścieżki prowadzącej do nierozpuszczalnych ciężkich produktów na ścieżkę prowadzącą do 1,4-benzochinonu. Katalizatory nie posiadające w pozycji adenda heterometalu nie dają benzochinonu jako produktu, a te zawierające atom kobaltu są najbardziej aktywne w tej reakcji. Katalizatory zawierające molibden w pozycji adenda wykazują dziesięciokrotnie wyższą aktywność od katalizatora zawierającego wolfram. Zaobserwowano, że w niskiej temperaturze tworzenie benzochinonu jest uprzywilejowane. Zmniejszenie ilości tworzonego benzochinonu w wyższych temperaturach jest skutkiem zmiany ścieżki reakcji, ponieważ w wyższej temperaturze faworyzowane jest tworzenie bifenyli. Ponadto zaobserwowano wpływ ilości użytego katalizatora na wydajność produktu. Badania kinetyczne potwierdziły, że reakcja utleniania fenolu jest reakcją pseudo pierwszorzędową.

Sole organiczne lakunarnych anionów Keggina zawierających heterometal okazały się wydajnymi katalizatorami reakcji utleniania fenolu. Uzyskane wyniki pokazują, że wprowadzenie heterometalu w pozycję adenda ma znaczący wpływ na przebieg reakcji.

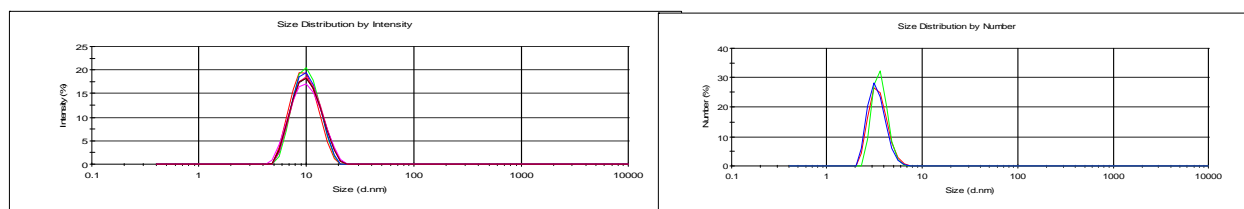
9. Enkapsulacja substancji aktywnych w rdzeniach emulsyjnych

Projekt badawczy promotorski N N204 255934 [2008-2010]

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

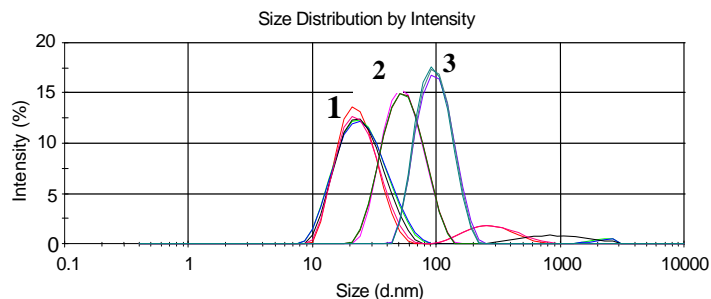
Mikroenkapsulacja to proces, w którym koloidalna cząstka lub kropla emulsji jest zamykana w powłoce o kreślonych właściwościach. Metoda sekwencyjnej adsorpcji polielektrolitów (PE) (layer-by-layer) jest używana jako jedna z konwencjonalnych metod do tworzenia powłok na koloidalnych rdzeniach. Najczęściej spotykaną metodą produkcji kapsułek jest pokrywanie stałego rdzenia koloidalnego warstwami PE. Użycie kropli emulsyjnych jako rdzenia daje nam możliwość zamknięcia olejo-rozpuszczalnego czynnika aktywnego w kapsułce o kontrolowanych rozmiarach i własnościach. Kapsułki otrzymane tą metodą mogą znaleźć zastosowanie w takich dziedzinach jak medycyna, kosmetyka, farmacja, czy przemysł spożywczy. Kapsułki z ciekłym rdzeniem mogą być użyte np. w kontrolowanym dostarczaniu leków, lub jako mikroreaktory.

W 2008 roku skupiono się na preparatyce emulsji zawierających barwniki fluorescencyjne. Emulsje te będą użyte w dalszej części projektu jako rdzenie do tworzenia nano- i mikrokapsułek. Przygotowano mikroemulsje zawierające barwnik, rozpuszczalny w oleju- (Cumarine 6), w dekanie lub oktanie stabilizowane surfaktantami Tween80+Span80 i butanolem jako kosurfaktantem. Otrzymano emulsje o średnim rozmiarze kropli 10nm. Metodą odwrócenia faz przygotowano nanoemulsje stabilizowane Tween80+Span80 i butanolem jako kosurfaktantem zawierające Cumarine 6 w oktanie, dekanie, oraz chloroformie. Otrzymano emulsje o średnim rozmiarze kropli 30nm. Do celu enkapsulacji barwnika rozpuszczalnego w wodzie (Rodamina B) otrzymano mikroemulsje woda w oleju (toluen, dekan, oktan, cykloheksan) stabilizowane AOT. Średni rozmiar kropli był 4nm. Przykładowe rozkłady wielkości przedstawiono na Rys. 1.



Rys.1 Rozkład wielkości kropli mikroemulsyjnych a) cykloheksan/T80/woda b) woda/AOT/oktan

Przygotowano również szereg emulsji zawierających źródła krzemionki w chloroformie (TEOS (Tetraethyl orthosilicate), APS (3-Aminopropyl)triethoxysilane) stabilizowanych Tweenem80. Otrzymano emulsje w zakresie wielkości od 20 do 100nm. (Rys. 2.)



Rys.2 Rozkład wielkości kropli emulsyjnych zawierających 20% TEOS lub APS w chloroformie/Tween80/woda.

PROJEKTY BADAWCZE HABILITACYJNE

1. Mechanizmy reakcji na mononuklearnych centrach żelazowych i manganowych w niehemowych enzymach aktywujących tlen

Projekt badawczy habilitacyjny N204 173 31/3823 [2006-2008]

(dr Tomasz Borowski, prof. Ewa Brocawik)

W ramach projektu zaplanowano zbadanie, przy użyciu metod teoretycznych, molekularnego przebiegu procesów katalitycznych dla trzech metaloenzymów: dwóch wiążących żelazo w centrum aktywnym (oksygenazy hydrochinonów - PCD, oksygenazy apokarotenoidów - ACO) oraz jednego wiążącego jon manganu (dekarboksylazy szczawianowej OxDC). Wybrane enzymy wykorzystują tlen cząsteczkowy w charakterze substratu (PCD, ACO) lub aktywatora (OxDC) i katalizują reakcje: otwarcia pierścieni hydrochinonów (PCD), rozcięcia łańcucha karotenoidów (ACO), oraz dysproporcjonowania szczawianu do CO₂ i HCOO⁻ (OxDC).

Planowane prace obliczeniowe przeprowadzono na zakupionym z pozyskanych środków klastrze komputerowym złożonym z czterech jednostek centralnych, każda dysponująca ośmioma CPU. Z uzyskanego finansowania pokryto również zakup licencji na programy kwantowo-chemiczne Jaguar oraz Molcas.

Molekularne mechanizmy reakcji katalitycznych PCD oraz ACO zostały przebadane metodami chemii kwantowej (DFT) zastosowanymi do supermolekularnych modeli centrów aktywnych w kompleksach enzym-substraty. Uzyskane wyniki opublikowano w pracach [1] oraz [2].

Ze względu na brak danych strukturalnych dla adduktu OxDC-szczawian, strukturę tego kompleksu enzym-substrat (E-S) wymodelowano metodami modelowania molekularnego. W tym celu wyznaczono parametry pola siłowego amber dla kofaktora manganowego ze związanym szczawianem, a następnie wykorzystano je w symulacjach dynamiki molekularnej dla makromolekularnego kompleksu E-S w środowisku wodnym. Wyznaczono również profil klasycznego potencjału średniej siły dla współrzędnej opisującej zbliżanie katalitycznej grupy glutaminianu do skoordynowanego z Mn szczawianu. Wymodelowana struktura będzie punktem wyjścia do badań kwantowo-chemicznych nad mechanizmem reakcji katalitycznej OxDC.

Wyniki uzyskane w trakcie prac nad tym projektem oraz wybrane wcześniejsze publikacje składają się na rozprawę habilitacyjną, znajdującą się obecnie w recenzji.

[1] T. Borowski, P.E.M. Siegbahn, *J. Am. Chem. Soc.*, 128 (2006) 12941-12953

[2] T. Borowski, M.R.A. Blomberg, P.E.M. Siegbahn, *Chem. Eur. J.*, 14 (2008) 2264-2276

PROJEKTY BADAWCZE POL POST DOC II

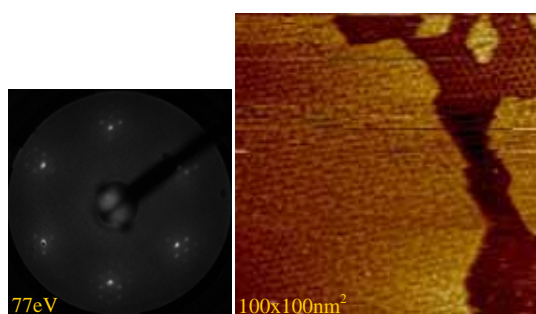
1. Epitaksjalne nanostruktury tlenkowe na metalicznych podłożach monokrystalicznych

Projekt badawczy POL-POSTDOC II [2006-2009]
(kierownik projektu: dr Dorota Wilgocka-Ślęza)

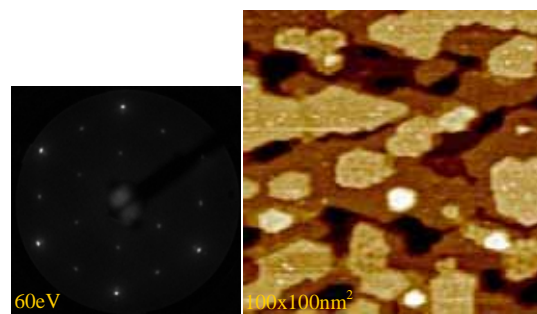
Zgodnie z harmonogramem projektu zrealizowano następujące zadania: „Opracowanie technologii preparatyki nanostruktur tlenkowych” oraz „Badania STM struktury i morfologii dla wybranego układu tlenek-metal”.

W ramach procedur preparacyjnych opracowano otrzymywanie tlenków żelaza FeO(111) oraz Fe₃O₄(111) na podłożu monokrystalicznym Pt(111). Najlepszą strukturę warstw FeO otrzymuje się na drodze utleniania pojedynczych monowarstw Fe przy ciśnieniu tlenu 5×10^{-8} mbara w temperaturze 280°C (ekspozycja 2L), a następnie wygrzewania w warunkach UHV przy temperaturze 600°C. FeO obserwowano nawet po kilkunastu takich cyklach (1cykl daje jedną monowarstwę -ML FeO), podczas gdy dane literaturowe wskazują, że FeO na Pt(111) jest stabilne tylko do 2.5 ML. W przypadku Fe₃O₄ optymalną metodą otrzymywania jest reaktywna depozycja Fe przy ciśnieniu 8×10^{-6} mbara w temperaturze 250°C, a następnie wygrzanie UHV w temperaturze 500°C. Powyższą metodą uzyskano warstwy Fe₃O₄ o grubościach od kilku do 100 Å. We wszystkich przypadkach zastosowano izotop ⁵⁷Fe w celu przeprowadzenia pomiarów metodą spektroskopii moessbauerowskiej elektronów konwersji.

Badania STM powierzchni obu tlenków wskazują na wysoki stopień ich uporządkowania. Cechą charakterystyczną powierzchni FeO jest obecność nadstruktury Moire’a będącej konsekwencją niedopasowania sieciowego pomiędzy FeO(111) i Pt(111) (11%). Ślady takiej nadstruktury w obrazach LEED obserwowano aż do 13 ML FeO. Stwierdzono, że FeO rośnie warstwa po warstwie. Na obrazach STM uzyskanych dla różnych grubości FeO (1-7ML) można jednocześnie obserwować tylko dwa poziomy, których różnica wysokości odpowiada dokładnie monowarstwie FeO. Nadstruktura Moire’a występuje na wszystkich poziomach, jednak jej charakter oraz periodyczność wyraźnie zmienia się wraz grubością warstwy. Okres nadstruktury zmienia się pomiędzy 20 a 50 Å, podczas gdy heksagonalna periodyczność atomowa pozostaje stała i wynosi 3 Å. W przypadku Fe₃O₄(111) badania STM wskazują, że struktura nie rośnie idealnie warstwowo, lecz wzrost jest raczej typu Stranskiego-Krastanowa. Na skanach można wyróżnić do pięciu poziomów wysokości wysp, z których najwyższe mają ok. 50 Å czyli ~10 ML Fe₃O₄. Powierzchnie wysp są atomowo gładkie i charakteryzują się wysokim stopniem uporządkowania. Generalnie brak jest nadstruktury, a period atomowy wynosi ok. 6Å. Tylko na powierzchni nielicznych, niewielkich wysepek pojawia się nadstruktura o okresie 35-40 Å i okresie atomowym 3 Å.



Obrazy LEED i STM dla 2 ML FeO. Na obrazie STM widoczne są różne nadstruktury dla poziomu niższego (obszar ciemniejszy) oraz wyższego (jaśniejszy).



Obrazy LEED i STM dla 16 Å Fe₃O₄. Widoczne są nieliczne wyspy z nadstrukturą.

2. Ustalenie norm dopuszczalnych fluktuacji mikroklimatu dla drewna polichromowanego

Projekt badawczy POL-POSTDOC II [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Michał Łukomski)

Głównym celem projektu jest dokładne, ilościowe ustalenie fluktuacji parametrów powietrza bezpiecznych dla pokrytych polichromią powierzchni drewnianych. W drugim roku realizacji projektu, główny nacisk położony został na rozwój optycznych metod analizy stanu zachowania pokrytych warstwami malarskimi powierzchni. Zbudowano i zaadoptowano do pomiarów terenowych interferometr plamkowy (electronic speckle pattern interferometer – ESPI), który służy do nieinwazyjnej i bezkontaktowej detekcji oraz opisu defektów powierzchni malarskiej w ich wczesnym stadium rozwoju.

Przystosowanie interferometru plamkowego do eksperymentów w warunkach terenowych wymagało uproszczenia układu optycznego tego urządzenia i opracowania specjalnych procedur pomiarowych. Opracowano trzy różne wersje układu pomiarowego oraz odpowiadające im procedury pomiarowe. Najprostszą z nich jest Numeryczna Korelacja Obrazu (DIC - Digital Image Correlation). Nie wymaga ona zastosowania w układzie pomiarowym wiązki odniesienia, przesuwника fazy światła ani układu polaryzatorów ustalających stosunek natężeń wiązek laserowych. Jednak metoda ta daje bardzo ograniczone i wyłącznie jakościowe wyniki w porównaniu z pełną wersją interferometru plamkowego. Aby pokonać te ograniczenia opracowano również układ interferometru, którego działanie opiera się na obserwacji zmian badanych powierzchni wywołanych wzrostem temperatury lub dźwiękiem. Ta metoda jest znacznie dokładniejsza, ale również znacznie trudniejsza do zaadoptowania we wnętrzach muzeów lub zabytkowych kościołów. Mimo to dzięki właściwemu wyborowi konstrukcji urządzenia oraz algorytmu zapisu wyników pomiaru możliwe było zbudowanie przenośnej wersji interferometru umożliwiającego pomiary deformacji powierzchni na poziomie mikrometrów. Opracowana wielopoziomowa procedura obróbki danych eksperymentalnych pozwala na analizę wyników na wybranym poziomie dokładności i złożoności.

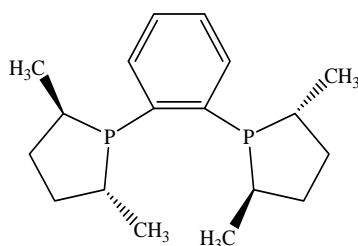
Równocześnie z rozwijaniem optycznych metod monitorowania uszkodzeń warstw dekoracyjnych prowadzono badania mechanicznych właściwości materiałów. Przy pomocy uniwersalnej maszyny testującej i dynamicznego analizatora właściwości mechanicznych zbadano długoczasową komponentę odpowiedzi drewna i zaprawy malarskiej na stałe wydłużenie, jak również stałą siłę. Wyniki tych pomiarów posłużą do ustalenia zależnych od warunków mikroklimatycznych krytycznych wartości siły i wydłużenia, powyżej których

3. Nowe chiralne kompleksy Ru(II): synteza i zastosowanie w katalizie asymetrycznej w układach homogenicznych i heterogenizowanych na mezoporowatych nośnikach.

Projekt badawczy POL-POSTDOC II [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

Celem projektu jest synteza i charakterystyka nowej grupy organometalicznych związków Ru(II) zawierających chiralną fosfinę DuPhos (Rys. 1) i trzy różne pierścienie pięciocłonowe: $\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5$ (Cp), $\eta^5\text{-MeC}_5\text{H}_4$ (MeCp) i $\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5$ (Cp*), ich heterogenizacja na nośnikach mezoporowatych oraz określenie właściwości katalitycznych w warunkach homogenicznych i heterogenicznych.



Rys.1

W ramach realizowanego projektu opracowano metody otrzymywania ww. związków i ich heterogenizacji. Przeprowadzone badania z analogicznym związkiem Ru(II) zawierającym fosfinę DPVP $[(\eta^5\text{-MeC}_5\text{H}_4)\text{Ru}(\eta^3\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)(\eta^1\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)]^+$ pokazały, że stosowana przez nas metoda wymiany jonowej pozwala na otrzymanie katalizatorów heterogenicznych, w których struktura zarówno związku osadzanego jak i nośnika nie ulega zmianie podczas procesu heterogenizacji. Katalizatory tak przygotowane są stabilne w warunkach katalitycznego uwodorniania fenyloacetyleny, łatwo odzyskiwalne i zachowują swoją aktywność katalityczną w kolejnych reakcjach.

Obecnie opracowywana jest metoda asymetrycznego uwodorniania ketonów do alkoholi drugorzędowych na przykładzie acetofenonu i acetolu.

PROJEKTY BADAWCZE ZAMAWIANE

1. Nowe materiały katalityczne jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska

Projekt badawczy zamawiany PBZ-KBN-116/T09/2004 [2005-2008]
(koordynator projektu: prof. Małgorzata Witko)

Projekt realizowano w ramach 13 tematów szczegółowych (w tym 3 w IKiFP PAN).

1. Opracowanie zdyspergowanych katalizatorów metalicznych i stopowych o kontrolowanych właściwościach fizykochemicznych i katalitycznych dla kluczowych procesów przemysłowych i ochrony środowiska.

1a. Układy mono- i bimetaliczne osadzone na węglach aktywnych jako katalizatory do usuwania chloru ze związków organicznych oraz do syntezy amoniaku

Otrzymano katalizatory metaliczne (Ru, Pd, Ni, Pt) naniesione na wysokiej czystości wysokopowierzchniowe węgle aktywne oraz nanorurki. Katalizatory modyfikowano dodatkiem Ba i Cs (Ru/C), oraz Ni i Pt (Pd/C). Wyjaśniono działanie promotorów Ba i Cs w katalizatorach Ru/C do syntezy amoniaku. Wykazano, że układ Ni/C jest bardzo efektywnym katalizatorem hydroodchlorowania, a dodatek Ni poprawia aktywność i selektywność układów Pd/C, za sprawą nawęglania fazy Ni. Przeprowadzone obliczenia kwantowo-chemiczne potwierdziły sugerowany mechanizm reakcji.

1b. Naniesione katalizatory metaliczne w reakcjach z udziałem tlenu węgla

Otrzymano serię katalizatorów Au/Ce_{1-x}Zr_xO₂ do niskotemperaturowego utleniania CO. Najlepsze z nich wykazują właściwości stwarzające realne przesłanki ich praktycznego wykorzystania. Wykazano wysoką aktywność i selektywność wybranych katalizatorów Pt/SnO₂ w reakcji selektywnego utleniania CO w obecności H₂ i zaproponowano jej mechanizm. Wyjaśniono mechanizm promotującej roli potasu w katalizatorach Au/nośnik (Fe₂O₃, TiO₂) w reakcji niskotemperaturowego utleniania CO. Określono wpływ prekursora rodu na właściwości bimetalicznych katalizatorów Ni-Rh naniesionych na Al₂O₃ oraz MgO w reakcji reformingu CH₄ ditlenkiem węgla.

1c. Zastosowanie techniki DIM do otrzymywania zdyspergowanych katalizatorów metalicznych i stopowych o kontrolowanych właściwościach fizykochemicznych i katalitycznych dla kluczowych procesów przemysłowych i ochrony środowiska”

Technikę DIM wykorzystano do otrzymania serii nośnikowanych (γ -Al₂O₃) katalizatorów metalicznych (Ni, Ni-Re, Ru, Ag, Pd, Pd-Ag). Katalizatory zostały przetestowane w reakcjach bezpłomieniowego utleniania metanu, całkowitego spalania CO oraz par węglowodorów, reformingu oraz uwodornienia CO₂. Skonstruowano prototypowy reaktor CSTR (Continuous Stirred Tank Reaktor) sprzężony z wagą, który zespala możliwości pomiarowe reaktora bezgradientowego i metod termogravimetrycznych. Istnieje możliwość wdrożenia tej konstrukcji do produkcji.

1d. Otrzymanie zdyspergowanych katalizatorów nanometalicznych jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska

Zsyntetyzowane katalizatory palladowe na nośnikach tlenkowych zastosowano w reakcjach Hecka i Suzuki uzyskując wysokie wydajności produktów. Wykazano, że w warunkach reakcji katalitycznych Pd(II) ulega redukcji do Pd(0) o rozmiarach krystalitów ok. 7 nm. Otrzymano nanocząstkowe katalizatory palladowe naniesione na funkcjonalizowanych polimerach. Wykazano, że ich aktywność katalityczna w reakcji Suzuki zależy w największym stopniu od sposobu redukcji palladu. Opracowano metodę syntezy nanocząstek Rh(0) stabilizowanych na poliwinylpiperolidonie (PVP). Odkryto ich aktywność katalityczną w reakcji polimeryzacji fenyloacetyleny a przebieg reakcji śledzono metodami TEM i AFM.

1e. Pd zdyspergowany w matrycach polimerowych – nowe układy katalityczne dla procesów uwodorniania węglowodorów nienasyconych

Pallad osadzano na funkcjonalizowanych żelach polimerowych. Stwierdzono że właściwości polimerów: długość łańcucha, rodzaj grup funkcyjnych, stopień usieciowania, wpływały na tworzenie nano-cząstek Pd, ich stabilizację i lokalizację w objętości ziaren katalizatorów. Dla wszystkich polimerów uzyskano katalizatory o wysoko zdyspergowanym Pd (2 – 20 nm). W obecności wszystkich katalizatorów selektywność uwodornienia alkinów do alkenów była wysoka, ok. 90 %. Najbardziej aktywne i selektywne oraz stabilne w kolejnych cyklach reakcji uwodorniania okazały się katalizatory bazujące na żelach polimerowych typu „egg-shell”.

1f. Opracowanie technologii produkcji preredukowanych katalizatorów żelazowych w oparciu o katalizatory zużyte

Badania wpływu warunków i sposobu pasywacji katalizatora żelazowego na kinetykę jego redukcji wykazały, że warstwę pasywną katalizatora tworzą nanokrystality o budowie zbliżonej do γ -Fe₂O₃. Stwierdzono, że stabilną warstwę tlenkową na powierzchni katalizatora utlenianego w wysokich temperaturach tworzy związek Fe₈AlO₁₂ o strukturze odwróconego spinelu. Opracowano sposób pasywacji katalizatora w przemysłowej jednostce syntezy amoniaku i jego kontrolowanego wyładunku z reaktora. Opracowano proces regeneracji zużytych katalizatorów żelazowych z jednostek syntezy amoniaku w kraju.

2. Opracowanie nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych o programowanych właściwościach do procesów katalizy środowiskowej oraz do otrzymywania wysoko przetworzonych związków organicznych.

2a. Nanostrukturalne katalizatory na bazie V₂O₅ do selektywnej katalitycznej redukcji NO i do rozkładu NO

Otrzymano i scharakteryzowano katalizatory wanadowe, osadzone na anatazie i rutyli, z dodatkiem Cr, Nb i Sn. Przeprowadzono eksperymentalne i teoretyczne badania mechanizmu reakcji NH₃-SCR na powierzchniowych formach V₂O₅. Badania aktywności katalitycznej różnych płaszczyzn V₂O₅ w procesie aktywacji cząsteczek NH₃ na grupach OH obecnych na powierzchniach (010), (001), (100), przeprowadzone metodą ab-initio DFT w modelu klastrowym, wykazały, że NH₃ ulega stabilizacji na wszystkich grupach OH, z utworzeniem wiązań wodorowych. Stwierdzono, że w procesie redukcji NO_x mogą brać udział zarówno powierzchnia wysyciona (010), jak i powierzchnie niewysycione (100) i (001).

2b. Opracowanie innowacyjnych tlenkowych układów katalitycznych o projektowanej strukturze aktywnych w reakcji redukcji kwasów i bezwodników kwasowych, w tym kwasów tłuszczowych i ich pochodnych.

Opracowano metody syntezy katalizatora tlenkowego nowego typu (Fe+CoO+NiO/SiO₂) aktywnego w redukcji alifatycznych kwasów karboksylowych i tłuszczowych (od C₃ do C₂₀) pod ciśnieniem atmosferycznym z wydajnością od 13 (C₁₀) do 52% (C₃). W wyniku redukcji otrzymywano pierwszorzędowe alkohole i aldehydy – cenne surowce przemysłu chemicznego. Katalizator nie wymagający podwyższonego ciśnienia znacząco obniża przemysłowe koszty otrzymywania pożądaných produktów (1-alkoholi i aldehydów). Może także znaleźć zastosowanie w przetwórstwie odpadowych frakcji olejów i tłuszczów do produktów wyżej przetworzonych.

2c. Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych o programowanych właściwościach do neutralizacji par toksycznych rozpuszczalników

Z prekursorów hydrotalkitowych otrzymano nanostrukturalne katalizatory tlenkowe Cu-Mn, wykazujące wyjątkową aktywność w reakcji całkowitego spalania toluenu. Przypisano ją tworzeniu się silnie amorficznych faz spinelowych, zawierających Cu, pokrewnych odwróconemu spinelowi Mn₃O₄. Opracowano technologię produkcji katalizatorów w formie monolitycznej, do praktycznego zastosowania w przemyśle. W oparciu o uzyskane wyniki wyprodukowano szarzę przemysłową katalizatora (400 l) i wykorzystano ją do skutecznego oczyszczania gazów w reaktorze

przemysłowym, w reakcji utleniania związków organicznych zawierających azot, w Fabryce Osłonek Białkowych „Fabios”.

2d. Opracowanie podstawy technologii wytwarzania nanofotokatalizatorów z surówców krajowych, aktywnych w zakresie widzialnym, do utleniania zanieczyszczeń organicznych w wodzie i ściekach.

Otrzymano fotokatalizator TiO₂-azot, który skutecznie rozkłada barwniki azowe i fenol w roztworach wodnych jak i na powierzchni katalizatora „*in situ*”. Otrzymany fotokatalizator posiada cząstki o wymiarze ok. 300-400 nm i krystality o wymiarze 10-20 nm i może być stosowany w zawieszynie do oczyszczania wód i ścieków z zanieczyszczeń organicznych. Uzyskana fotoaktywność w zakresie UV-Vis jest wyższa od przemysłowego fotokatalizatora P25 firmy Degussa. Modyfikacja TiO₂ azotem wydłuża czas życia fotokatalizatora. Otrzymany fotokatalizator znalazł zastosowanie do ochrony konstrukcji budowlanych jako samooczyszczający się materiał. Wyprodukowano pierwszą partię farb fotoaktywnych.

3. Opracowanie innowacyjnych układów katalitycznych na podstawie struktur porowatych o kontrolowanej architekturze w zastosowaniu do reakcji oczyszczania powietrza ze szkodliwych zanieczyszczeń oraz do przyjaznej środowisku syntezy organicznej.

3a. Synteza, badania spektroskopowe, katalityczne i obliczenia kwantowo-mechaniczne nowych katalizatorów zeolitowych do reakcji przyjaznych dla środowiska.

Po raz pierwszy w literaturze oznaczono ilościowo stężenia różnych form jonów Co²⁺ i Co³⁺ w zeolitach o strukturze ZSM-5 i ferrierytu. Rozszerzono zastosowanie hybrydowej metody QM/MM na układy zeolitowe zawierające centra kobaltowe. Istotną nowością części teoretycznej pracy jest przygotowanie i przetestowanie nowej metodologii badania struktury i właściwości *dowolnych* centrów kobaltowych w *dowolnych* zeolitach. Opracowano aktywne i selektywne katalizatory do procesów SCR NO, utleniania benzenu do fenolu, utleniania norbornenu do epoksydu i izomerizacji α -pinenu.

3b. Opracowanie innowacyjnych katalizatorów o kontrolowanej strukturze porowatej na podstawie flogopitowych i wermikulitowych minerałów warstwowych dla procesów konwersji tlenków azotu do diazotu

Otrzymano stabilne termicznie katalizatory procesu DeNO_x wykorzystując naturalne minerały warstwowe – wermikulit i flogopit, interkalowane SiO₂ lub Al₂O₃ oraz dotowane Fe i Cu. Wykazywały one dużą aktywność, szczególnie w zakresie wysokich temperatur (300-500°C). Szczególnie obiecujące okazały się wermikulity interkalowane tlenkiem glinu lub krzemu oraz dotowane żelazem. Modyfikowane miki okazały się także dobrymi katalizatorami procesu selektywnego utleniania NH₃ do azotu i pary wodnej. Na szczególne podkreślenie zasługuje bardzo wysoka selektywność do azotu nawet w temperaturach przekraczających 500°C.

3c. Mezoporowate materiały modyfikowane metalami jako katalizatory służące ochronie środowiska

Otrzymano mezoporowate materiały typu MCM-41 i MCF modyfikowane niobem, wanadem i cyrkonem (w tym wiele po raz pierwszy), i zastosowano je jako nośniki Au i Pt. Stwierdzono, że centra redoksove obecne na powierzchni mezoporowatych materiałów niobokrzemianowych są aktywne w obecności tlenu i prowadzą do bardzo wysokiej selektywności tworzenia formaldehydu z metanolu oraz wysokiej aktywności w reakcji SCR-NO propenem. Unikatowe właściwości w procesie WGS wykazał katalizator AuMCM-41. Najatrakcyjniejszym adsorbentem dla odorów okazał się Au/MCM-41, który ulegał samoregeneracji poprzez katalityczne utlenianie.

W wyniku realizacji projektu powstało 139 publikacji ogłoszonych w czasopiśmie o cyrkulacji międzynarodowej i recenzowanych materiałach konferencyjnych, 184 doniesienia na międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych (referaty, komunikaty, postery), 19 zgłoszeń patentowych, 5 rozpraw doktorskich, 6 prac magisterskich i dyplomowych.

2. Chemia perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla

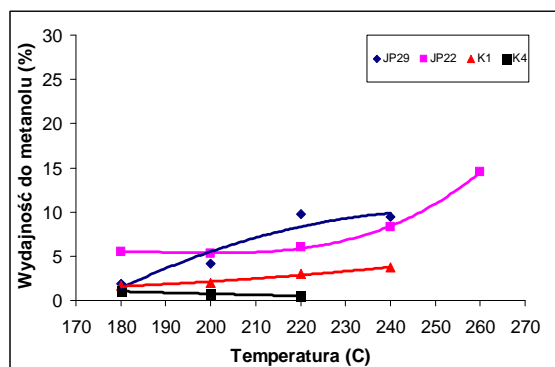
Wielofunkcyjne katalizatory na osnowie minerałów warstwowych do jednoetapowego procesu: gaz syntezowy → metanol → eter dimetylowy

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

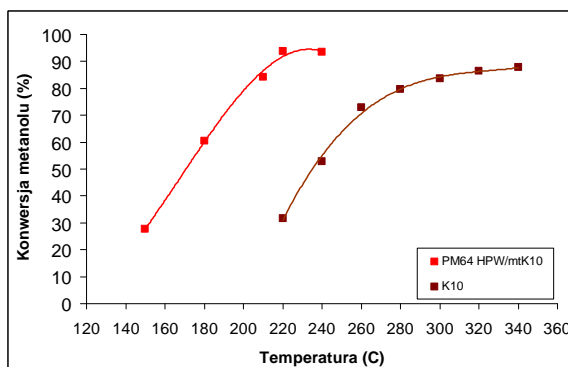
Celem projektu jest synteza i optymalizacja nowej generacji bifunkcyjnych katalizatorów, przeznaczonych do bezpośredniej konwersji gazu syntezowego do eteru dimetylowego (DME), poprzez metanol jako produkt pośredni (proces STD: syngas-to-dimethylether).

W 2008 roku przeprowadzono badania mające na celu optymalizację poszczególnych składowych katalizatora bifunkcyjnego. Katalizator do syntezy metanolu z gazu syntezowego otrzymywano z hydrotalkitów Cu-Zn-Al, domieszkowanych cyrkonem. Reakcję prowadzono w wysokociśnieniowym reaktorze przepływowym, w zakresie temperatur 180–260°C, pod ciśnieniem 80 bar, GHSV=3600 h⁻¹. Reagenty analizowane są przy użyciu chromatografu gazowego z detektorem TCD i FID. Przykładowe wyniki pokazuje Rys.1. Katalizatory CuZnAl (K1) i CuZnAl (K4) otrzymane odpowiednio przy pH 7 i 9 wykazują niższą aktywność niż katalizatory CuZnAl z dodatkiem cyrkonu, wprowadzonego bądź jako składnik warstwy w hydrotalkitu (JP22) bądź też poza strukturę hydrotalkitu (JP29).

Odwodnienie metanolu do DME testowano na katalizatorach typu heteropolikwas/nośnik montmorillonitowy. Badaniom aktywności poddano sam nośnik: handlowy montmorillonit K10 oraz wodorową formę montmorillonitu z Milowic (H-mt) i układy, w których heteropolikwas H₃PW₁₂O₄₀ został naniesiony na nośnik K10 i H-mt w ilości jednej i dwóch monowarstw, metodą impregnacji konwencjonalnej i modyfikowanej. Testy prowadzone były w reaktorze przepływowym w zakresie temperatur 120 – 360°C pod ciśnieniem 1 bar, V_{kat}=0,25-0,33cm³. Zarówno substrat jak i produkty reakcji odwodnienia metanolu analizowane były przy użyciu chromatografu gazowego z detektorem TCD.



Rys. 1. Synteza metanolu z gazu syntezowego



Rys. 2. Reakcja odwodnienia metanolu.

Naniesienie heteropolikwasu na nośnik prowadzi do wzrostu konwersji metanolu dla wszystkich badanych układów. Jedynym obserwowanym produktem odwodnienia metanolu na badanych katalizatorach jest DME. Przykładowo, w temperaturze 220°C konwersja metanolu wynosi odpowiednio 30% dla samego nośnika K10 i 90% dla heteropolikwasu H₃PW₁₂O₄₀ naniesionego na nośnik K10 (Rys.2). Najwyższą aktywność katalityczną, w całym zakresie badanych temperatur posiada katalizator H₃PW₁₂O₄₀/H-mt otrzymany metodą impregnacji modyfikowanej. W temperaturze 120°C konwersja metanolu dla tego układu osiąga wartość 65%, podczas gdy dla innych badanych układów konwersja metanolu na poziomie 60-65% osiągana jest dopiero w temperaturach 180-240°C.

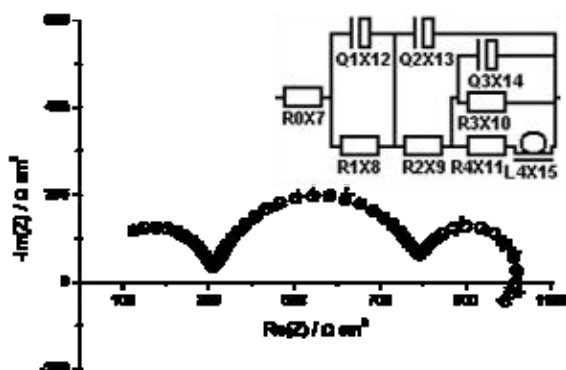
3. Badania właściwości fizykochemicznych warstw pasywnych na stopach aluminium, magnezu i tytanu oraz powłok stopowych Zn-Ni, Zn-Co, Sn-Zn, Co-P i Ni-P na stalach

Analiza impedancyjna procesu korozji stopów magnezu

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

(kierownik tematu: doc. Paweł Nowak)

Ze względu na rosnące koszty energii przemysł lotniczy poszukuje nowych materiałów, które przy nie gorszych od materiałów tradycyjnych parametrach wytrzymałościowych charakteryzowałyby się niższą gęstością. Obniżenie masy elementów konstrukcyjnych ma olbrzymie znaczenie nie tylko w lotnictwie, ale także i w innych dziedzinach transportu i nie tylko transportu. W związku z tym coraz większego znaczenia nabierają w przemyśle produkcji środków transportu stopy magnezu. Jednakże magnez jest metalem reaktywnym, łatwo ulegającym korozji, a utworzona na jego powierzchni w trakcie korozji warstwa tlenku nie jest tak szczelna jak, na przykład, w przypadku tytanu czy glinu. W związku z tym elementy konstrukcyjne wykonane ze stopów magnezu stawiają wysokie wymagania przed konstruktorami, jeśli chodzi o ich ochronę przed korozją. Elementy takie są zwykle pokrywane odpowiednimi powłokami malarskimi. Najlepsza jednak powłoka malarska nie ochroni znajdującej się pod nią powierzchni metalu, jeśli powierzchnia ta nie jest zabezpieczona poprzez odpowiednią modyfikację warstwy wierzchniej. Warstwy takie uzyskuje się najczęściej przez traktowanie powierzchni metalu odpowiednimi roztworami bądź też przez anodyzację w odpowiednim roztworze. Przedmiotem badań w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni w 2008 roku była charakterystyka fizykochemiczna, a w szczególności badanie odporności korozyjnej stopów magnezu stosowanych w przemyśle lotniczym. Badania przeprowadzono na serii rozmaicie traktowanych próbek stopów magnezu, z wytworzona warstwą wierzchnią oraz nie pokrytych żadną warstwą, zarówno na próbkach dostarczonych przez zleceniodawcę (Politechnika Śląska) jak i przygotowanych we własnym zakresie. W badaniach korozji najczęściej stosowane są metody elektrochemiczne, takie jak metoda krzywych polaryzacyjnych czy spektroskopia impedancyjna. Przeprowadzono porównanie przydatności obu powyżej wymienionych metod do badania korozji stopów magnezu. Opracowano procedury pomiarowe oraz procedury opracowania wyników pomiarów, w szczególności dla spektroskopii impedancyjnej (Rys. 1). Opracowano również sposób przygotowania próbek stopów metali do badań korozyjnych metodami elektrochemicznymi. Wytypowano najlepsze procedury przygotowania warstw wierzchnich. Doświadczenia zdobyte na stopach magnezu mogą być w znacznej mierze przeniesione na inne metale i stopy przewidziane do badania w ramach projektu.



Rys. 1 Zastępczy układ elektryczny stosowany w analizie danych impedancyjnych i przykładowe dopasowanie tego układu do danych pomiarowych korozji stopu magnezu, nie pokrytego warstwą wierzchnią w roztworze testowym o składzie: NaHCO_3 138 mg dcm^{-3} , Na_2SO_4 148 mg dcm^{-3} , NaCl 165 mg dcm^{-3} (ASTM D1384 - 7). Zakres częstotliwości: 65,5 kHz-65,5 mHz, pomiar przy potencjale korozji.

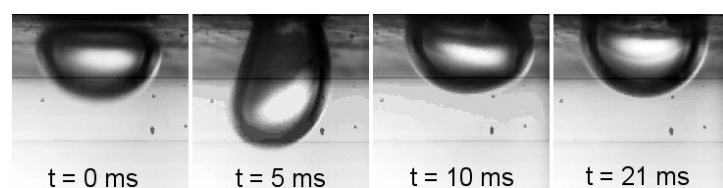
4. Nowoczesne technologie oraz zaawansowane materiały i wyroby w zrównoważonym rozwoju przemysłu metali nieżelaznych

Badanie mechanizmu działania kolektorów i modyfikatorów flotacji

Projekt badawczy zamawiany PBZ-3/3/I-1.2b [2008]
(kierownik zadania: prof. Kazimierz Małysa)

Celem badań było określenie wpływu i mechanizmu działania wytypowanych przez Instytut Metali Nieżelaznych w Gliwicach (IMN) przemysłowych odczynników zbierających i modyfikatorów flotacyjnych na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego podczas zderzenia pęcherzyka powietrza z powierzchniami chalkozynu oraz galeny. Badano wpływ różnych odczynników na stabilność filmu zwilżającego powstającego w warunkach dynamicznych. Dla wybranych układów wyznaczono także wielkości statycznych kątów zwilżania. Próbkę, na których przeprowadzono badania, zostały dostarczone przez IMN, w postaci pastylek chalkozynu oraz galeny o odpowiedniej granulacji. Otrzymane pastylki były krążkami o średnicach ok. 10 i 5,4 mm oraz grubości od 2,2 - 3 mm w przypadku chalkozynu i grubości 1,2–1,8 mm w przypadku galeny. Zdjęcia mikroskopowe powierzchni pastylek chalkozynu i galeny wykazały ich niehomogeniczność. Rozmiary porów, szczelin oraz nierówności na powierzchni obu próbek były rzędu od kilku do kilkudziesięciu mikrometrów.

Do pomiarów kinetyki utworzenia kontaktu trójfazowego zaadaptowano zestaw pomiarowy złożony z kolumny o przekroju kwadratowym, kapilary, systemu dozowania gazu, pozwalającego generować w kontrolowany sposób pęcherzyki powietrza oraz szybkiej kamery. Przebiegi kolizji z powierzchniami pastylek chalkozynu i galeny rejestrowano z częstotliwością 1182 Hz oraz 1040 Hz (klatek na sekundę). Próbkę każdorazowo przed pomiarem przemywano acetonem i dużą ilością wody destylowanej. Na powierzchni galeny nie powstawał kontakt trójfazowy w żadnym z roztworów badanych odczynników flotacyjnych, co świadczy o stabilności zwilżającego filmu powstającego pomiędzy powierzchniami galeny oraz pęcherzyka powietrza. W przypadku chalkozynu powstawanie kontaktu trójfazowego stwierdzono w przypadku 15 kombinacji (na 23 badane) odczynników flotacyjnych, a czas powstawania kontaktu trójfazowego (liczony od momentu pierwszej kolizji do powstania kontaktu trójfazowego) zmieniał się od 26 ms (ksantogenian etylowy z amylopektyną – rys.1) do ok. 200ms (MX+LET wraz z Rokopol 30P10 i Rokopol 30P27). Na rys. 1 przedstawiono powstawanie kontaktu trójfazowego na powierzchni chalkozynu w roztworze ksantogenian etylowy 0,03g/l + amylopektyna 0,6g/l w pH=6 (po dekantacji). Średni czas tworzenia kontaktu wynosił 26,5 ms, a kąt zwilżania utworzonego kontaktu wynosił 74,2°.



Prędkości pęcherzyków w momencie pierwszej kolizji, U_{terminal} były w większości badanych roztworów rzędu 30-35 cm/s, czyli zbliżone do prędkości w wodzie destylowanej. Tylko w roztworach zawierających Rokopol 30P10, Rokopol 30P27 lub Rokaminę K30 prędkość pęcherzyków była wyraźnie niższa i wynosiły nawet 14-15 cm/s. Niższe wartości prędkości granicznych pęcherzyka wskazują, że Rokopole oraz Rokamina ulegały adsorpcji na powierzchni pęcherzyka, a utworzona dynamiczna warstwa adsorpcyjna (DAL), hamując ruchliwość powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz powodowała zmniejszenie prędkości pęcherzyka.

KRAJOWE SIECI BADAWCZE

1. SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(koordynator sieci: prof. Piotr Warszyński)

Podstawowym celem Sieci Badawczej 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.

2. 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 CO₂, 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 nanoszenie kontaktów elektrycznych. W badaniach tych wykonuje się charakterystykę powierzchni dostarczonych próbek przy użyciu technik mikroskopowych (SEM) oraz spektroskopowych (XPS, AES, EDX). Ponadto, IKiFP PAN dostarcza testowe próbki związków mogących służyć jako katalizatory procesu trawienia oraz jako substancje zwiększające wewnętrzny współczynnik odbicia światła w ogniwie.

3. 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.

4. ARTMAG Nanostruktury magnetyczne do zastosowania w elektronice spinowej

Krajowa sieć badawcza MNiSzW
(kierownik tematu: dr Nika Spiridis)

Samo-organizujące się struktury magnetyczne na naturalnie modulowanych powierzchniach.

W ramach zadania badane były właściwości strukturalne (mono)-warstw Fe na nominalnie płaskim kryształ W(110) jak i na kryształ wyciętym pod kątem 6.3° w stosunku do powierzchni (110), co odpowiada nominalnej orientacji (540). Stwierdzono, że nominalnie płaskie podłoże wykazuje istotne pofalowanie o amplitudzie dochodzącej do 5 nm na obszarze rzędu $1 \mu\text{m}$, któremu odpowiada struktura tarasów w górę i w dół (rozdzielonych monoatomowymi stopniami w kierunku [110]) o średniej szerokości 20 nm. Pofalowanie jest prawdopodobnie wynikiem naprężeń powstających w kryształ w trakcie jego obróbki termicznej. Regularna struktura stopni o periodyczności 2 nm na powierzchni wicynalnej (540) najwyraźniej stabilizuje tę powierzchnię i amplituda korugacji jest w tym przypadku o rząd wielkości mniejsza (ok. 0.5 nm). Przy pomocy mikroskopii STM zobrazowano różnice wzrostu Fe na obu powierzchniach. Do najbardziej uderzających należy zaliczyć pojawianie się wyraźnej struktury wysepek wzdłuż stopni w monowarstwie Fe na W(540), a także silną anizotropię ferromagnetycznych wysp Fe formujących się na wicynalnej powierzchni pod wpływem wygrzewania.

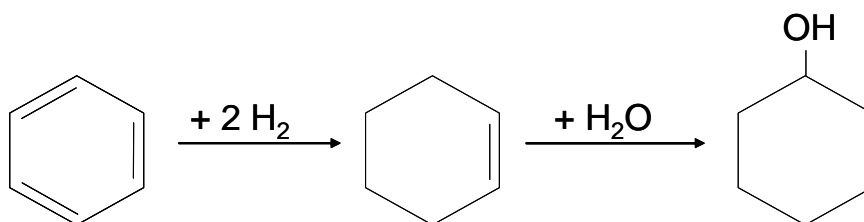
INICJATYWA TECHNOLOGICZNA I

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)

Celem projektu jest opracowanie naukowych podstaw procesu syntezy cykloheksanolu z benzenu w stopniu umożliwiającym jego wdrożenie w kraju, co najmniej w skali produkcji eksperymentalnej, bądź w skali pilotowej. Stosowana obecnie metoda otrzymywania cykloheksanolu i cykloheksanonu poprzez utlenianie cykloheksanu, ze względu na niską konwersję (4%) i znaczną ilość produktów ubocznych stanowi najmniej wydajny proces spośród wszystkich technologii wykorzystywanych w przemyśle chemicznym. Mimo to, przez ostatnie półwiecze nie została ona zastąpiona przez rozwiązanie alternatywne. Proponowana przez nas metoda produkcji cykloheksanolu poprzez uwodornienie benzenu jest metodą dużo tańszą i bezpieczniejszą niż utlenianie cykloheksanu. Jest także metodą, w której praktycznie nie powstają produkty uboczne, ponieważ tworzący się obok cykloheksenu cykloheksan sam jest atrakcyjnym surowcem chemicznym.



Projekt obejmuje dwie fazy - fazę A, czyli fazę badawczą, oraz fazę B, która jest przygotowaniem do wdrożenia. W ramach dwuletniej fazy A głównymi zadaniami są opracowanie katalizatora i optymalizacja procesu uwodornienia benzenu, oraz opracowanie katalizatora i optymalizacja procesu uwodnienia cykloheksenu do cykloheksanolu. W ramach rocznej fazy B przewidywane jest opracowanie projektu procesowego instalacji produkcyjno-doświadczalnej syntezy cykloheksanolu z benzenu poprzez cykloheksen.

W roku 2008 opracowano procedury syntezy metalicznych katalizatorów do częściowego uwodornienia węglowodorów nienasyconych (Ru bez nośnika, Ru na węglu aktywnym, Ru na mieszanych tlenkach pochodzenia hydrotalkitowego, organometaliczne kompleksy Ru, Pd na nośniku polimerowym). Otrzymane katalizatory scharakteryzowano przy pomocy XRD, XPS, FTIR, NMR, UV-Vis, SEM. Przeprowadzono badania katalityczne mające na celu optymalizację katalizatora stosowanego w reakcji uwodornienia benzenu do cykloheksenu. Najlepsze wyniki dotychczasowych testów prowadziły do mieszaniny poreakcyjnej o składzie około 27% cykloheksenu, 33% cykloheksanu i 40% nieprzereagowanego benzenu.

Listy intencyjne wyrażające zainteresowanie wdrożeniem opracowanej w ramach projektu technologii zostały podpisane przez dwa polskie koncerny chemiczne, Zakłady Azotowe "Puławy" SA i Zakłady Azotowe w Tarnowie-Mościcach SA.

PROJEKTY 6. PROGRAMU RAMOWEGO UE

1. ToK-CATA Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts



Projekt EU 6th FP MTKDCT-2004-509832 TOK-CATA
(ToK koordynacja) [2004-2008]
(koordynator projektu: prof. Serwicka-Bahranowska)

Projekt TOK-CATA został zakończony we wrześniu 2008 r. Był to projekt typu “transfer wiedzy”, w którym Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN był instytucją koordynującą wymianę naukową i prace badawcze z partnerami, którymi były: University of Nottingham (Wielka Brytania), Consejo Superior de Investigaciones Cientificas (Hiszpania), Stuttgart Universität (Niemcy), Humboldt Universität (Niemcy), Lunds Universitet (Szwecja). Program badawczy realizowano w IkiFP PAN przez wybranych w drodze konkursu zagranicznych specjalistów oraz w instytucjach partnerskich przez stypendystów z IkiFP PAN. Głównym celem projektu były badania związane z projektowaniem i syntezą porowatych katalizatorów o kontrolowanych właściwościach.

Realizowano trzy zasadnicze kierunki badawcze:

1. Projektowanie, synteza i charakteryzacja fizyko-chemiczna porowatych materiałów katalitycznych
Badania obejmowały opracowanie wielofunkcyjnych materiałów opartych na zeolitach, mezoporowatych krzemionkach, porowatych heterostrukturach ilastych i nanostrukturach węglowych. Były ukierunkowane na kontrolowanie właściwości kwasowo-zasadowych, redoksowych i teksturalnych. Właściwości katalityczne modelowano poprzez insercję mono i polimerycznych cząstek tlenków lub związków tlenkopodobnych (np. GaOx, NbOx, heteropolikwasy/sole) oraz osadzanie makrocyklicznych związków organometalicznych (metaloporfiryny, metalokompleksy fosfoallilowe).
2. Testy katalityczne
Otrzymane katalizatory badano w reakcjach o istotnym znaczeniu dla ochrony środowiska (usuwanie lotnych zanieczyszczeń organicznych z powietrza), reakcjach mających na celu poprawę selektywności i zmniejszenie nakładów energetycznych (selektywne utlenianie, utleniające odwodornienie, izomeryzacja i alkilacja), oraz w procesach otrzymywania wysoko przetworzonych związków organicznych (utlenianie w fazie ciekłej).
3. Modelowanie teoretyczne
Badania obejmowały opis/przewidywanie właściwości katalitycznych wybranych centrów aktywnych (np. określanie właściwości kwasowych i potencjałów redoks), modelowanie oddziaływań typu host-guest (np. centra Cu i Co w fojazyście), oraz ocenę prawdopodobieństwa dyfuzji cząsteczek reagentów (np. NO i CO) w różnych strukturach mezoporowatych.

W projekcie uczestniczyło 17 naukowców (9 zagranicznych specjalistów gościło w IkiFP PAN, 8 pracowników IkiFP PAN w instytucjach partnerskich).

Rezultaty badań przeprowadzonych w ramach projektu były szeroko rozpowszechniane. Stypendyści TOK-CATA przedstawili 49 wystąpień konferencyjnych (wykłady na zaproszenie, komunikaty ustne i postery). Wyniki badań zaprezentowano w 24 publikacjach. Kolejnych 7 publikacji jest przesłanych do druku lub jest w przygotowaniu. Stypendyści wygłosili 23 wykłady w IkiFP PAN i w instytucjach partnerskich.



2. ACENET ERA-NET for Applied Catalysis in Europe

Projekt EU 6th FP ERAC 011784 ACENET (CA) [2004-2008]
(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Projekt ACENET jest projektem typu ERA-NET, finansowanym ze środków 6. Programu Ramowego Unii Europejskiej, mającym na celu współpracę i koordynację działań związanych z badaniami podejmowanymi na poziomie krajowym i regionalnym w krajach członkowskich UE i stowarzyszonych. Projekty takie pozwalają na tworzenie sieci współpracy i otwieranie krajowych programów badawczych dla innych państw. Współpraca w tym zakresie prowadzona jest przez ministerstwa, organizacje finansujące badania naukowe, instytuty badawcze oraz organizacje zarządzające badaniami naukowymi, ze szczególnym naciskiem na wypełnianie luki pomiędzy badaniami prowadzonymi na poziomie akademickim i przemysłowym. W projekcie bierze udział 12 partnerów z 10 krajów: Netherlands Organisation for Scientific Research, Holandia; Bundesministerium für Bildung und Forschung, Niemcy; Centre National de la Recherche Scientifique, Francja; Fundação para a Ciência e a Tecnologia, Portugalia; Ministero dell'Istruzione della Università e della Ricerca and Consorzio Reattivity e Catalisi, Włochy; General Secretariat for Research & Technology, Ministry of Development, Grecja; Ministerio de Educación y Tecnología, Hiszpania; Forschungszentrum Jülich GmbH, Niemca; Engineering and Physical Sciences Research Council, Wielka Brytania, Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, Polska, Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, Polska oraz The Irish Research Council for Science, Engineering and Technology, Irlandia. W ramach projektu ERA NET ACENET, po około 2,5 letnim procesie przygotowawczym ogłoszono konkurs na projekty badawcze, który przeprowadzony został w oparciu o wspólnie wypracowane i uzgodnione procedury. Temat konkursu: „Zrównoważone, innowacyjne procesy katalityczne z lepszym wykorzystaniem energii i węgla” szeroko uwzględnił obszary priorytetowe zdefiniowane w strategicznej agendzie badawczej europejskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, oraz cele uznane za kluczowe w długofalowych założeniach polityk naukowych poszczególnych państw – Partnerów Projektu.

Wspólny konkurs na projekty badawcze w ramach ERA NET ACENET był otwarty dla podmiotów spełniających narodowe i europejskie kryteria uczestnictwa z tych państw – Partnerów Projektu, które zadeklarowały gotowość finansowania grup badawczych ze swoich krajów, pod warunkiem uzyskania pozytywnej oceny złożonego projektu. Ocena została przeprowadzona zimą 2008 r. przez międzynarodowy panel ekspertów. W jej wyniku do realizacji zakwalifikowano 6 projektów, w tym jeden z udziałem partnera z Polski. Zwieńczeniem konkursu było spotkanie oficjalnie rozpoczynające realizację projektów wyłonionych we wspólnym, międzynarodowym konkursie.

Ponadto, w ramach projektu został stworzony Wspólny Program Szkoleń i Edukacji, którego elementami są: Zintegrowany Kurs Katalizy, Szkoła Katalizy, kursy Ustawicznego Szkolenia Zawodowego oraz Edukacyjne Centrum Doskonałości. W trakcie trwania projektu zrealizowano wiele pilotowych modułów kształceniowych w różnych krajach partnerskich, w tym w Polsce.

31 sierpnia 2008 r. oficjalnie wygasł kontrakt z Komisją Europejską, w ramach którego działał ERA NET ACENET. Partnerzy projektu postanowili złożyć wniosek do KE o przedłużenie jego prac o kolejne 2 lata, tj. do 31 sierpnia 2010 r. W tym celu został przygotowany nowy program pracy, obejmujący ogłoszenie drugiego wspólnego konkursu, a także działania w dziedzinie edukacji, m.in. kurs w Hiszpanii, szkołę letnią w Grecji oraz Edukacyjne Centrum Doskonałości w Polsce. W tym okresie Polskę w ERA NET ACENET reprezentuje Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w Warszawie.

3. IDECAT Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production



Projekt EU 6th FP NMP2-011730-2 IDECAT (NoE) [2005-2009]
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Projekt IDECAT (Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production) jest Siecią Doskonałości powstałą w 2005 r., finansowaną ze środków 6. Programu Ramowego Unii Europejskiej. 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.

Celem sieci jest 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 dzieli się na 5 tematów: 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.

Trwałej integracji ma służyć wirtualny Europejski Instytut Badawczy w dziedzinie Katalizy (ERIC), który jest stowarzyszeniem zarejestrowanym w Belgii z siedzibą w Brukseli. ERIC powołało 14 instytucji sieci IDECAT, zaś pozostałe 3 będą z nim związane tzw. Porozumieniem Ramowym. Docelowo skład ERIC będzie powiększany o inne instytucje publiczne i prywatne, małe i średnie przedsiębiorstwa i duże firmy przemysłowe działające w dziedzinie katalizy i zajmujące się zarówno badaniami, jak i praktycznymi wdrożeniami.

Rok 2008 był czasem dalszych prac nad dopracowaniem dokumentów prawnych regulujących zasady funkcjonowania ERIC, tj. Statutu i Wewnętrznych Regulacji oraz Porozumienia Ramowego, tj. zasad współpracy ERIC a tych partnerów sieci, którzy nie zostali założycielami stowarzyszenia. Przygotowano i podpisano wszystkie niezbędne dokumenty i pełnomocnictwa niezbędne do zarejestrowania stowarzyszenia. Rejestracja odbyła się 13 listopada 2008 r. w kancelarii notarialnej w Brukseli. W ramach Wspólnego Programu Integracji udoskonalono też narzędzia internetowe dla lepszego przepływu informacji w ramach sieci oraz kontynuowano działania na rzecz większej aktywizacji kobiet w nauce.

W ramach Wspólnego Programu badań kontynuowano prace w ramach wszystkich czterech zadań badawczych, tj.: 1) tworzenie i udoskonalenie nanoobiektów oraz nanoorganizacja, 2) tworzenie i projektowanie nowych wielofunkcyjnych, nanostrukturalnych materiałów, 3) wypełnianie luki w multidyscyplinarnych strategiach badawczych, 4) procesy ochrony środowiska i zrównoważona energia i produkcja. Działalność w zakresie niniejszego Programu prowadzone była we współpracy z innymi uczestnikami sieci.

W działaniach na rzecz rozpowszechniania wiedzy, IKiFP PAN brał udział w krakowskim Festiwalu Nauki oraz zorganizował Dzień Otwarty. Ponadto pracownicy i doktoranci Instytutu uczestniczyli w konferencjach i seminariach organizowanych w ramach sieci, w tym w międzynarodowej konferencji pt. „Kataliza dla Społeczeństwa” zorganizowanej w IFiFP PAN w Krakowie z okazji jubileuszu 40 lecia istnienia placówki.

W ramach programu Transferu Wiedzy i Technologii odbyły się 2 spotkania Rady Przemysłowej

4. SENSORGAN Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organ

Projekt EC 6th FP SSP-4 SSPI-CT-2004-022695 SENSORGAN
(STREP) [2006-2008]
(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)

Rok 2008 był ostatnim z trzech lat zaplanowanych na realizację projektu poświęconego opracowaniu systemu czujników do wykrywania szkodliwych warunków dla instrumentów organowych. Główne zadania badawcze instytutu w omawianym projekcie są podzielone na pakiety, z czego prace nad dwoma pierwszymi rozpoczęły się już w roku 2006.

Realizacja pierwszego zadania polegała na opracowaniu prostego i ekonomicznego czujnika emisji akustycznej, który pozwoliłby na śledzenie pęknięcia drewnianych elementów organów i innych dzieł sztuki. Badania kontynuowane w ostatnim roku skupiały się na optymalizacji metody emisji akustycznej do testów polowych na obiektach dziedzictwa kultury w szczególności zabytkowych organach.

Wcześniejsze badania laboratoryjne i testy polowe pozwoliły na identyfikację grupy krytycznych parametrów charakteryzujących pęknięcie drewnianych elementów. Jednakże, wyniki otrzymane w trzecim pakiecie zadań wskazały na potrzebę opracowania dodatkowej procedury analizy i fuzji danych zastosowanych w opracowanym czujniku. Zastosowana procedura ma pozwolić na wyodrębnienie sygnałów związanych ze zniszczeniem od typowych sygnałów tła obecnych w obiektach zabytkowych jak i specyficznych sygnałów takich jak dźwięk dzwonów. Zastosowane rozwiązanie bazuje na dwóch głównych cechach aktywności dzwonów – jest ono periodyczne w czasie a jego spektralna charakterystyka obejmuje zarówno pasma charakterystyczne dla zniszczenia jak i te niezwiązane ze zniszczeniem. W końcowej fazie, opracowany czujnik przeszedł procedurę optymalizacji parametrów pracy i jest w trakcie pomiarów na obiekcie referencyjnym. Współpraca nad wprowadzeniem tego czujnika do produkcji z firmą Hanwell Instruments Ltd z Wielkiej Brytanii, która rozpoczęła się w zeszłym roku była kontynuowana także w tym roku. Firma Hanwell, która posiada prawa do produkcji, opracowała wersję rynkową czujnika, który jest obecnie kalibrowany w naszym instytucie.

W drugim pakiecie zadań, instytut jest odpowiedzialny za pomiary i analizę mikroklimatu w obiekcie referencyjnym – zabytkowej bazylice p.w. Św. Andrzeja Apostoła w Olkuszu. Pomiary są prowadzone w sposób ciągły i skorelowany z pomiarami emisji akustycznej, co pozwala na precyzyjną identyfikację fluktuacji mikroklimatu powodujących pęknięcie drewnianych elementów wyposażenia.

W trzecim pakiecie zadań, opracowany czujnik został przetestowany w rzeczywistych warunkach polowych w obiekcie referencyjnym w Olkuszu. Pomiary prowadzone *in situ* wykazała użyteczność opracowanego czujnika; jednakże wskazały także na źródło potencjalnych problemów. Głównym problemem była aktywność akustyczna dzwonów kościelnych. Emisja akustyczna generowana przez dzwony okazała się trudna do odfiltrowania używając standardowej procedury laboratoryjnej, głównie ze względu na szerokie pasmo emitowanych sygnałów. Z tego względu, opracowano i wprowadzono do modułu analizy danych nową procedurę. Opracowany czujnik został zainstalowany w obiekcie referencyjnym w celu przeprowadzenia końcowych testów w trakcie kluczowego okresu Świąt Bożego Narodzenia wraz z innymi czujnikami rozwiniętymi przez partnerów.

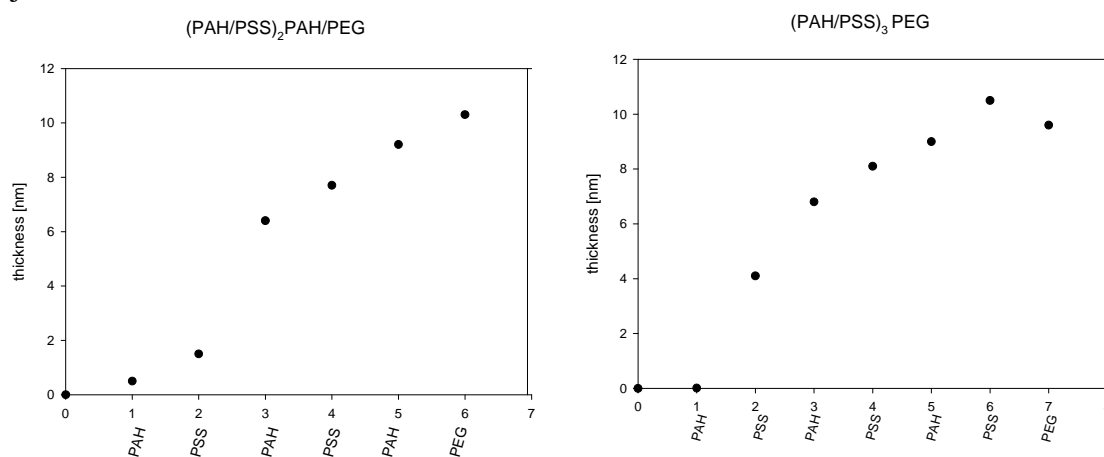
5. NANOMEDPART Multifunctional Particulate System for Nanomedicine

EC 6th FP ERA-NET MATERA Projekt SPR NANOMEDPART [2007-2010] (KOORDYNACJA)
(koordynator projektu: prof Piotr Warszński)

Celem niniejszego projektu jest 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. Projekt jest realizowany przy współpracy SINTEF Materials and Chemistry Oslo, Hebrew University Jerusalem, Institute for Cancer Research at the Norwegian Radium Hospital Oslo i Politechniką Wrocławską - Wydział Chemiczny. Jednym z naszych zadań w projekcie jest opracowanie technik otrzymywania nanocząstek i nanokapsulek (zakresie 20-50nm) zawierających aktywne związki z powłokami przystosowanymi do terapii rakowych i antybakteryjnych.

W 2007 roku skupiono się na badaniach dotyczących glikolu (poli)etylenowego (PEG) na powierzchniach polielektrolitowych filmów wielowarstwowych. Do badań użyliśmy układu doświadczalnego do pomiarów elipsometrycznych grubości filmów adsorpcyjnych „in-situ” w cieczach. Zastosowany zestaw pomiarowy umożliwia monitorowanie zmian wielkości parametrów elipsometrycznych Δ i Ψ wraz z postępem adsorpcji polimerów(polielektrolitów) z roztworów wodnych na powierzchniach płytek krzemowych. Do pomiarów jest wykorzystywany laser o długości fali 532 nm. Próbka jest oświetlana pod kątem 60°.

Polielektrolity PAH - poly(allylamine hydrochloride) and PSS - poly(sodium 4-styrenesulfonate) były adsorbowane sekwencyjnie na powierzchni próbki. Następnie PEG o masie cząsteczkowej 10kD był adsorbowany na powierzchni ostatniej warstwy filmu polielektrolitowego (PAH lub PSS). Grubość powstałego filmu była obliczana przez dopasowanie modelu dwuwarstwowego (film na warstwie SiO₂ na powierzchni krzemu - constant n,k model) do sygnału elipsometrycznego. Zaobserwowaliśmy wzrost grubości filmu gdy PEG był adsorbowany na powierzchni PAH (prawdopodobnie w skutek wytworzenia wiązań wodorowych). Wzrost ten nie był obserwowany na powierzchni PSS. Prowadzone równoległe pomiary zmian potencjału zeta przy adsorpcji PEG nie dały jednoznacznego wyniku. Prawdopodobnie masa cząsteczkowa PEG jest za mała aby jego adsorpcja na filmie polielektrolitowym w sposób zauważalne wpływała na potencjał zeta.



Rys. 1. Wyniki pomiarów grubości filmów PAH/PSS.

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

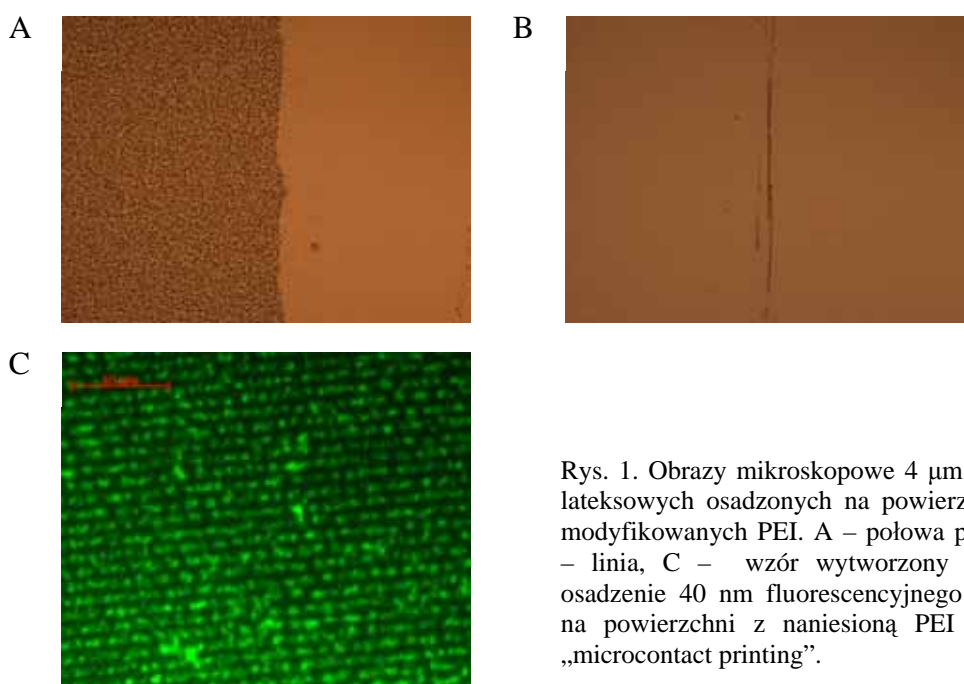
EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt SPR PARFUN [2008-2011]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Kontrolowana adhezja cząsteczek polistyrenowych na powierzchniach modyfikowanych PEI

Głównym celem projektu PARFUN jest opracowanie technologii wytwarzania nowej generacji mikrocząstek używanych jako przekładki dystansowe („spacery”) w produkcji wyświetlaczy ciekłokrystalicznych (LCD). Prowadzone w projekcie prace mają charakter zarówno badań podstawowych jak i aplikacyjnych. Celem naukowym projektu jest rozwinięcie metod modyfikacji powierzchni a także określenie mechanizmu oddziaływań mikrocząstek o zmodyfikowanych właściwościach adhezyjnych z powierzchniami szkła lub polimeru. Wprowadzenie do produkcji elastycznych wyświetlaczy wymaga „spacerów” o podwyższonej adhezji do powierzchni wyświetlaczy. Wymagane są również nowe metody rozprowadzania cząstek w uprzednio zdefiniowane położenia.

Celem badań prowadzonych w 2008 roku było rozwinięcie metodyki modyfikacji powierzchni szklanych lub plastikowych płytek dla poprawienia adhezji mikronowych cząstek lateksowych a następnie zastosowanie tej metodyki do kontrolowanego osadzania ich osadzania według określonego wzoru. Do modyfikacji powierzchni użyliśmy kationowego polielektrolitu, poli(etylenoiminy) PEI, o masie cząsteczkowej 700 kD. PEI była adsorbowana dyfuzyjnie z roztworów wodnych, etanolowych, butanolowych i pentanolowych o stężeniu 500 ppm. Następnie cząstki lateksu polistyrenowego o średnicy 4 μm (dostarczone przez Conpart) były osadzane na zmodyfikowanych powierzchniach. Rysunek 1. przedstawia obrazy mikroskopowe płytek krzemowych modyfikowanych PEI w różny sposób, na których następnie były osadzane cząstki. W przypadku A, gdy połowa płytki była pokryta PEI widać wyraźnie ostrą granicę obszaru na którym osadzone są cząstki. Rysunek 1B i 1C ilustruje różne metody tworzenia wzoru na powierzchni. Przedstawione wyniki wskazują że kontrolowana modyfikacja powierzchni za pomocą PEI pozwala na osadzanie mikrosfer w z góry zdefiniowanych położeniach.



Rys. 1. Obrazy mikroskopowe 4 μm cząstek lateksowych osadzonych na powierzchniach modyfikowanych PEI. A – połowa płytki, B – linia, C – wzór wytworzony poprzez osadzenie 40 nm fluorescencyjnego lateksu na powierzchni z naniesioną PEI metodą „microcontact printing”.

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

EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt SPR NANOREP II [2008-2011]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

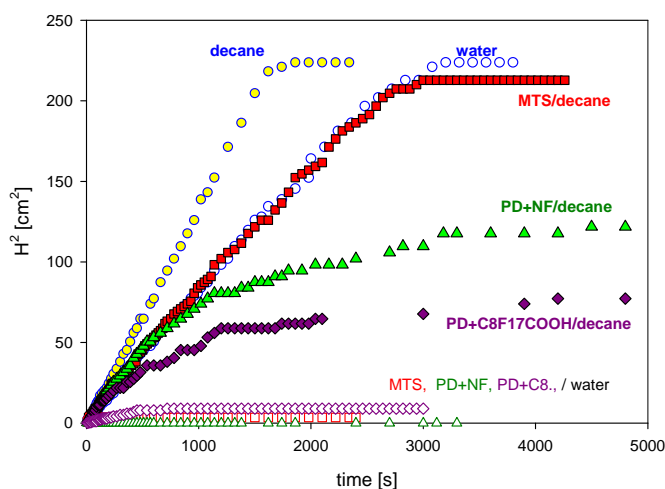
Modyfikacja powierzchni nano- i mikrocząstek jako wypełniaczy dla materiałów polimerowych

Głównym celem projektu jest opracowanie metodologii dotyczącej zastosowania nanocząstek jako wypełniaczy do tworzyw polimerowych oraz farb i lakierów dla poprawy właściwości mechanicznych i odporności na ścieranie. Badania koncentrują się na poszukiwaniu układów nanocząstek mogących znaleźć zastosowania w procesach technologicznych dotyczących: wytwarzania tworzyw termoplastycznych i konstrukcyjnych o podwyższonej odporności mechanicznej, wytwarzania powłok organicznych o podwyższonej odporności mechanicznej i właściwościach adhezyjnych do tworzyw termoplastycznych oraz produkcji termoutwardzalnych farb i lakierów o podwyższonej odporności na ścieranie.

Celem prowadzonych badań było określenie sposobu modyfikacji powierzchni szklanych mikrosfer poprawiającego ich właściwości jako wypełniaczy tworzyw fluoro- i termoplastycznych. Do pomiarów zwilżalności mikrosfer o modyfikowanych powierzchniach zastosowano metodę wzniesienia kapilarnego. Do analizy zastosowano równanie Washburn'a, przedstawiające kinetykę penetracji cieczy w głąb złoża składającego się ze z mikrosfer:

$$h^2 = \frac{r\gamma \cos\theta}{2\eta}t \quad \text{gdzie: } r = \frac{R_D^2}{R_S^2}, \quad R_D \text{ i } R_S - \text{średni hydrodynamiczny i średni statyczny}$$

promień porów, θ - kąt zwilżania, γ napięcie powierzchniowe cieczy. Jako ciecze penetrujące zastosowano wodę i dekan. Na Rys. 1 przedstawiono krzywe zależności kwadratu wysokości słupa cieczy penetrującej (wody lub dekanu) od czasu dla kolumny zawierającej szklane mikrosfery (o rozmiarach 40-60 μm), nie pokryte i pokryte MTEOS, PDADMAC z NAFIONem lub PDADMAC z kwasem heptafluorononylowym ($\text{C}_8\text{F}_{17}\text{COOH}$). W przypadku mikrosfer nie pokrytych obserwuje się podobną szybkość penetracji zarówno wody jak i dekanu. Gdy mikrosfery są pokryte warstwą hydrofobową obserwujemy różne szybkości penetracji dekanu przy równoczesnym braku penetracji wody. Najszybszą penetrację obserwujemy dla mikrosfer szklanych pokrytych przez MTEOS, a najwolniejszą dla układu PDADMAC z $\text{C}_8\text{F}_{17}\text{COOH}$.



Rys. 1. Wzniesienie kapilarne dla układu mikrosfery szklane - (40-60 μm) – woda lub dekan oraz dla mikrosfer szklanych pokrytych MTEOS, PDADMAC z NAFIONem i PDADMAC z $\text{C}_8\text{F}_{17}\text{COOH}$.

PROJEKTY 7. PROGRAMU RAMOWEGO UE

1. InGAS Integrated Gas Powertrain – Low Emission, CO₂ optimised and efficient CNG engines for passenger cars and light duty vehicles



Projekt EC 7th 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. 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 r. 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 r., o poziomie emisji niższym niż norma Euro 6.

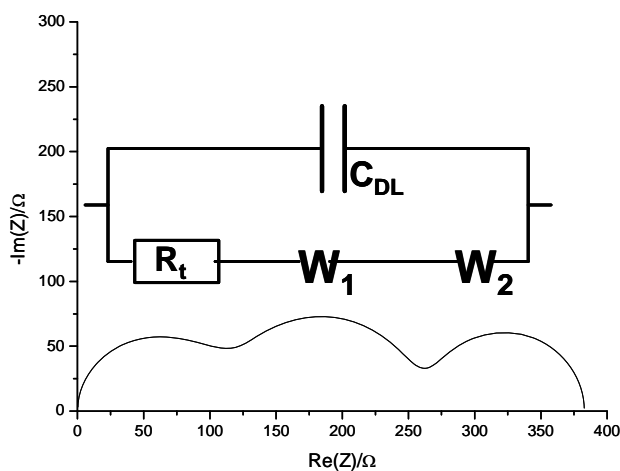
IKiFP PAN jest zaangażowany w prace w Subprojekcie B2, "Systemy oczyszczania dla samochodów osobowych z silnikiem CNG", w Zadaniu B2.2 (WP B2.2) pt. "Opracowanie zaawansowanych katalizatorów". Celem prowadzonych przez Instytut prac jest zaprojektowanie, synteza, charakteryzacja oraz katalityczne testowanie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

W listopadzie 2008 r. odbyło się spotkanie rozpoczynające prace projektu InGAS, na którym został przedstawiony zespół IKiFP PAN uczestniczący w projekcie oraz zadania do zrealizowania w ciągu najbliższego półrocza. Badania prowadzone w IKiFP PAN w ramach projektu InGAS będą obejmować katalizatory zaprojektowane w oparciu o mieszane układy tlenkowe oraz porowate kompozyty na osnowie naturalnych i syntetycznych krzemianów.

Istotnym elementem badań prowadzonych w IKiFP PAN będzie udział w fizykochemicznej charakteryzacji katalizatorów opracowanych przez innych partnerów projektu, głównie poprzez wykorzystanie metody ultra wysokorozdzielczej skaningowej mikroskopii elektronowej HRSEM i spektroskopii XPS.

Dyfuzja w cienkich warstwach na podłożu. Symulacja widm impedancyjnych.

Destrukcyjny wpływ otoczenia i wywołana korozją degradacja są poważnymi problemami, które ograniczają okres użytkowania pojazdu lub jego części. Najczęściej stosowanym sposobem ochrony oraz zwiększenia odporności struktur z metali i tworzyw sztucznych jest stosowanie powłok z polimerów organicznych. Jednakże proces degradacji może przebiegać znacznie szybciej w przypadku, gdy nastąpi przerwanie ciągłości warstwy ochronnej. Przedmiotem projektu MUST jest stworzenie nowego, aktywnego 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 jest symulacja procesów powierzchniowych i transportowych zachodzących w trakcie oddziaływania powierzchni pokrytej warstwą polimerową ze środowiskiem, a także procesów zachodzących w trakcie uwalniania czynników antykorozyjnych z kapsulek, ich transportu i oddziaływania z powierzchnią i z czynnikami korozyjnymi. Bardzo dogodną metodą badania przepuszczalności cienkich nieprzewodzących warstw na podłożu przewodzącym (na przykład warstwy lakieru na metalu) jest elektrochemiczna spektroskopia impedancyjna (ESI). Oczywiście tylko substancje elektroaktywne mogą być badane metodą ESI, jednakże czynniki korozyjne są zwykle substancjami elektroaktywnymi a procesy korozji metali prawie zawsze procesami elektrochemicznymi. W 2008 roku prowadzono symulację widm impedancyjnych układów, w których badana substancja dyfunduje kolejno poprzez kilka cienkich warstw i reaguje na powierzchni. Widma te porównywano z doświadczalnymi widmami otrzymanymi w układach modelowych. Wykazano, że impedancja dyfuzyjna, która w przypadku grubej warstwy ma dwa składniki: opornościowy i pojemnościowy, o równych wielkościach, dla warstwy bardzo cienkiej przy dostatecznie niskiej częstotliwości redukuje się do czystej oporności i staje się nierozróżnialna od oporności polaryzacyjnej. Podano metodę oszacowania wartości współczynnika dyfuzji dla substancji elektroaktywnej dyfundującej przez cienką warstwę z pomiarów widm ESI. Z symulowanych widm (Rys. 1) można wywnioskować, że w przypadku dyfuzji poprzez dwie cienkie warstwy, różniące się znacznie parametrami dyfuzyjnymi (współczynniki dyfuzji i grubość warstwy) można zaobserwować dwie stałe czasowe, związane z dyfuzją w tych dwóch warstwach.



Rys. 1. Symulowane widmo impedancyjne dla reakcji elektrodowej z dyfuzją jednej substancji elektroaktywnej poprzez dwie cienkie warstwy o znacząco różnych parametrach dyfuzyjnych (grubości i współczynniki dyfuzji). Na rysunku pokazano również zastępczy układ elektryczny użyty w symulacji.

3. SMOOHS Smart Monitoring of Historic Structures

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



Zrozumienie wywoływanych czynnikami środowiskowymi procesów niszczących obiekty zabytkowe jest koniecznym warunkiem dla ochrony tych obiektów i właściwego ich użytkowania zarówno dla publicznych jak i prywatnych celów.

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. W celu oceny i interpretacji danych zostanie stworzony przyjazne, modułowe oprogramowanie komputerowe. Oprogramowanie to będzie ogólnie dostępne (również w postaci kodów programistycznych) i otwarte na dalsze zmiany i modyfikacje. Dzięki modularności i otwartości stanowić będzie dynamiczne narzędzie rozszerzane i uaktualniane o nowe dane zarówno przez partnerów projektu jak i członków innych grup naukowych. System monitorowania będzie prosty a równocześnie niedrogi.

Projekt rozpoczął się pierwszego grudnia 2008. Podczas spotkania rozpoczynającego projekt pomiędzy partnerów rozdzielone zostały poszczególne zadania i zaplanowany harmonogram ich wykonania.

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, mgr Jan Mizera, dr Robert Socha, mgr Ewa Zackiewicz)

Powierzchnia $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ jako nośnik dla modelowych katalizatorów

Badane były warstwy $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ na $\text{MgO}(001)$ w funkcji temperatury wygrzewania dla lepszego poznania ich składu i struktury. Na powierzchniach o różnej terminacji, bogatej w żelazo lub bogatej w tlen, adsorbowano złoto, które formuje nanoklastery. Pokazano, że centrami nukleacji Au są miejsca zajmowane przez jony Fe.

Jako punkt wyjścia dla otrzymywania katalizatorów bimetalicznych porównano wzrost złota i srebra na powierzchni $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ bogatej w Fe. Zaobserwowano uderzające różnice w sposobach wzrostu obu metali. Dla tej samej temperatury nanoszenia, pomimo wyższej energii powierzchniowej, złoto wykazuje wzrost warstwa po warstwie, podczas gdy dla srebra, charakteryzującego się niższą energią powierzchniową, wbrew argumentom energetycznym zaobserwowano wzrost trójwymiarowych wysp. Ponieważ struktura obu metali jest identyczna (FCC), a stałe sieci bardzo zbliżone, różnice w sposobie wzrostu muszą wynikać z silnego oddziaływania elektronowego Au- Fe_3O_4 . Wnioskujemy, że w bimetalicznym układzie Au-Ag/ Fe_3O_4 , morfologia zbiorowiska klasterów będzie mogła prawdopodobnie być sterowana składem i warunkami nanoszenia.

Wzrost warstw metali i tlenków na wicynalnych powierzchniach.

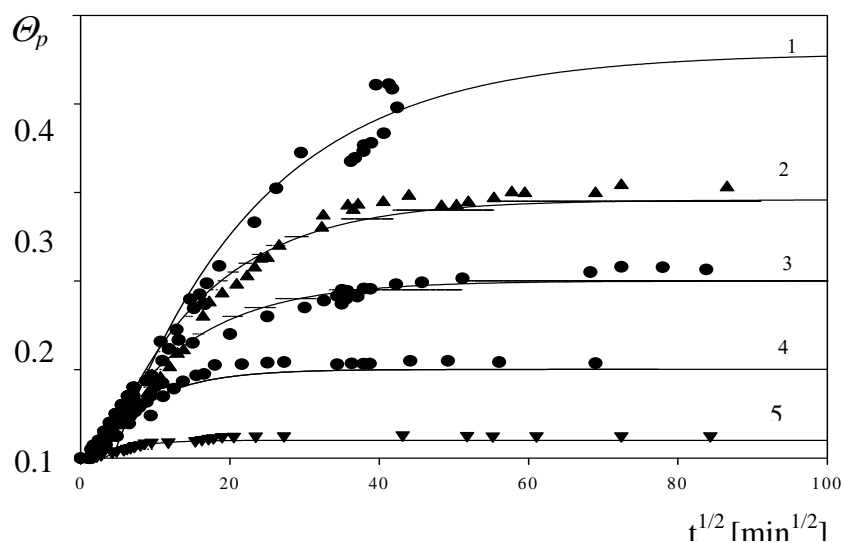
Powierzchnie wicynalne wykazują wysoką reaktywność, a także stanowią naturalne podłoża dla samoorganizującego się wzrostu warstw. Lateralna periodyczność powierzchni może być regulowana odpowiednią orientacją kryształu, co pozwala modelować różnie skoordynowane miejsca aktywne. Przeprowadzono testowe preparatyki dla dwóch powierzchni wicynalnych, W(540) i Pt(997), otrzymując regularną strukturę stopni o zadanej periodyczności. Powierzchnia W(540) była użyta dla otrzymania epitaksjalnej warstwy Au ze stopniami, natomiast odporna na utlenianie powierzchnia platyny służyła do otrzymywania wicynalnych powierzchni tlenkowych.

2. Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology

Projekt badawczy EU COST Action D43 [2006-2011]

(reprezentant Polski: prof. Zbigniew Adamczyk)

Osadzanie cząstek koloidalnych i biocząstek na powierzchniach międzyfazowych ciało stałe/elektrolit ma istotne znaczenie dla określenia mechanizmów i kinetyki wielu procesów takich jak: samoorganizacja, filtracja, separacja, chromatografia, testy immunologiczne, tworzenie zakrzepów i osadów w przeszczepach i sztucznych organach, itp. Głównym celem badań było ilościowe określenie kinetyki osadzania cząstek koloidalnych na powierzchniach modyfikowanych przez preadsorpcję polielektrolitów. Pierwszym etapem badań było nanoszenie warstwy polietyleno iminy (PEI) o ściśle zdefiniowanym pokryciu i dodatnim ładunku powierzchniowym. Następnie prowadzono pomiary kinetyki osadzania ujemnie naładowanych lateksów o rozmiarach cząstek 660 nm, stosując dyfuzyjny mechanizm transportu, przy użyciu mikroskopii optycznej w warunkach *in situ*. Typowe przebiegi kinetyczne przedstawiono na Rys. 1. Jak można zauważyć, zarówno początkowa szybkość osadzania cząstek, jak również pokrycia maksymalne są ilościowo opisywane modelem teoretycznym opartym na założeniu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji (krzywe ciągłe), w którym nie używano żadnych parametrów empirycznych. Uzyskane wyniki mają znaczenie poznawcze, wskazując, że metodyka osadzania cząstek koloidalnych umożliwia w precyzyjny sposób wyznaczyć obecność na powierzchniach międzyfazowych zaadsorbowanych makromolekuł lub białek.



Rys 1. Kinetyka osadzania cząstek lateksu (ujemnego) na powierzchniach pokrytych warstewką polielektrolitu (PEI) o różnym stężeniu, transport dyfuzyjny $I=10^{-3}$ M, pH = 6, 1) (●) $\Theta_{PEI} = 0.168$; 2) (▲) $\Theta_{PEI} = 0.116$; 3) (●) $\Theta_{PEI} = 0.098$; 4) (○) $\Theta_{PEI} = 0.074$; 5) (▲) $\Theta_{PEI} = 0.055$. Linie ciągłe przedstawiają wyniki teoretyczne obliczone numerycznie.

3. Wood Science for Conservation of Cultural Heritage

Projekt badawczy EU COST Action IE0601 [2006-2011]

(reprezentant Polski: doc. Roman Kozłowski)

Doc. Roman Kozłowski, który reprezentuje Polskę w Komitecie Zarządzającym Akcją, jest członkiem ośmioosobowego Komitetu Sterującego, jako kierujący grupą roboczą 2 "Ocena i diagnoza". Wziął udział w dwóch posiedzeniach Komitetu Sterującego zorganizowanych w 2008 roku, był współredaktorem materiałów konferencji Akcji we Florencji w 2007 roku oraz wszedł w skład Komitetu Naukowego kolejnej konferencji Akcji w Braga w Portugalii. W trakcie tej konferencji pracownicy instytutu zaprezentowali 1 referat ustny i 1 poster.

4. Physics of Droplets

Projekt badawczy EU COST Action P21 [2006-2010]

(reprezentant Polski: prof. Kazimierz Małysa)

W projekcie COST P21 "Physics of droplets" uczestniczy 27 zespołów z różnych instytucji badawczych z 16 krajów europejskich oraz z Australii Ian Wark Research Institute of University of South Australia w Adelaidzie. Koordynatorem projektu jest prof. N.Vandewalle, GRASP, Institut de Physique B5a Sart Tilman, Université de Liège, a polskim przedstawicielem w Management Committee jest prof. Kazimierz Małysa z Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN. Z Polski oprócz IKiFP PAN w realizacji projektu biorą także udział zespoły z Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN oraz Wydziału Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej.

W 2008 roku odbyły się 2 spotkania Management Committee (MC). 5th MC Meeting odbył się w dniu 16 maja 2008 r na Capri. 6th MC Meeting odbył się w dniu 16 października 2008 w Centrum Badawczym Procter & Gamble, w Brukseli i był połączony z 3rd IMPULSE Scientific Workshop. W obu tych spotkaniach uczestniczył prof. K. Małysa. Spotkania MC były połączone z roboczymi spotkaniami zespołów badawczych projektu COST P21. W spotkaniu, które odbyło się w dniu 15 maja, 2008 r na Capri, uczestniczyli z IKiFP PAN mgr A. Olszewska i prof K. Małysa, który przedstawił na nim referat: J. Zawała, K. Małysa, "Bubble velocity as a tool for monitoring water pollution by organic contaminants". W Scientific Workshop. COST/IMPULSE w dniu 16 października 2008 w Brukseli uczestniczył prof. K. Małysa i wygłosił referat: "Dynamics of the Bubble Collisions with Various Interfaces".

W dniach 12-14 maja 2008 r. została zorganizowana w ramach projektu COST P21 szkoła letnia: "1st Training School Physico-Chemical and Flow Behavior of Droplet-based Systems", w której uczestniczyła mgr A. Olszewska z IKiFP PAN.

We wrześniu 2008 r przebywała w IKiFP PAN w ramach programu COST P21, finansowanego w ramach COST-FEAST Initiative, dr M. Krasowska z Ian Wark Research Institute of University of South Australia w Adelaidzie. Jej pobyt był zrealizowany w ramach tzw. Short Term Scientific Mission (STSM) i był związany z zapoczątkowaniem wspólnych badań "Influence of electric charge and solid surface hydrophobicity on wetting film stability under static and dynamic conditions".

Dynamika oddziaływań poruszających się mikroobektów (cząstki, kropelki, pęcherzyki) z powierzchniami międzyfazowymi

Projektu Badawczy Specjalny Nr 45/N-COST/2007/0 jest realizowany przez trzy jednostki naukowe: i) Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, ii) Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, iii) Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej. Celem projektu jest pogłębienie wiedzy o zjawiskach związanych z ruchem i wzajemnymi oddziaływaniami pomiędzy mikroobektami (kropelki, cząstki, pęcherzyki) oraz pomiędzy tymi obiektami a różnymi powierzchniami międzyfazowymi o modyfikowanych, w sposób kontrolowany, właściwościach powierzchniowych (ładunek elektryczny, hydrofobowość, heterogeniczność, szorstkość) oraz o roli cienkich warstw fluidalnych (ciecz, gaz) w procesach koalescencji, osadzania, powstawania kontaktu trójfazowego itp. IKiFP PAN jest jednostką koordynującą projekt (prof. Kazimierz Małysa). Pierwsze spotkanie przedstawicieli jednostek realizujących projekt, na którym ustalono strategię realizacji projektu i wzajemnej współpracy odbyło się w Krakowie w IKiFP PAN w dniu 3 stycznia 2008 r. W ciągu roku było jeszcze kilka spotkań wzajemnych uczestników projektu, a prof. K. Małysa wygłosił w Instytucie Podstawowych

Problemów Techniki PAN w dniu 19 marca 2008 r. referat pt.: "Dynamika powstawania i przerywania filmów ciekłych podczas kolizji pęcherzyka z różnymi powierzchniami międzyfazowymi".

W okresie sprawozdawczym prowadzono w IkiFP PAN badania nad modyfikacją parametrów ruchu poruszających się mikroobiektów spowodowaną adsorpcją jonowych i niejonowych surfaktantów oraz polielektrolitów, a także nad wpływem energii kinetycznej i modyfikacji właściwości powierzchni międzyfazowych na powstawanie kontaktu trójfazowego. Stan warstwy adsorpcyjnej (stopień pokrycia adsorpcyjnego) i jej dynamiczna struktura wpływają w znaczący sposób na prędkość pęcherzyków i przebieg kolizji z powierzchniami międzyfazowymi oraz powstawanie kontaktu trójfazowego. W wodzie czystej, pozbawionej surfaktantów powierzchnia międzyfazowa ciecz/gaz jest ruchliwa i dlatego prędkości lokalne osiągnęte przez pęcherzyk są duże, o wiele większe od prędkości obiektów o podobnych kształtach i nieruchomej powierzchni. Obecność substancji powierzchniowo aktywnej powoduje wytworzenie dynamicznej warstwy adsorpcyjnej, czego konsekwencją jest obniżenie ruchliwości powierzchni międzyfazowej i spadek prędkości wypływania pęcherzyków. W wykonanych badaniach wpływu adsorpcji jonowych surfaktantów oraz pH roztworów i obecności elektrolitów obojętnych stwierdzono istotny wpływ każdego z tych czynników (stężenie surfaktantu, elektrolit, pH) na parametry ruchu pęcherzyków gazowych tj. prędkości lokalne i graniczne, oraz rozmiar i stopień deformacji kształtu. Wartości prędkości graniczne pęcherzyków malały od 34.8 ± 0.3 cm/s w wodzie destylowanej do około 15 cm/s w stężonych roztworach n-dodecylosiarczanu sodu (SDDS). Wykazano, że 10% pokrycie adsorpcyjne SDDS jest wystarczające do całkowitego unieruchomienia powierzchni międzyfazowej pęcherzyka. Obecność elektrolitu lub zmiana pH wpływa na prędkości lokalne i graniczne pęcherzyków i wykazano, że efekt ten związany jest ze zmianami napięcia powierzchniowego tych roztworów, czyli ze zmianami pokrycia adsorpcyjnego powierzchni pęcherzyka przez SDDS. Rozmiary pęcherzyków w roztworach SDDS o stężeniu $1 \cdot 10^{-4}$ M malały od wartości 1.45 ± 0.01 mm w roztworze bez dodatków do wartości 1.39 ± 0.01 mm w roztworze o pH 2.

**PROJEKTY EUROPEJSKIEGO
OBSZARU GOSPODARCZEGO**

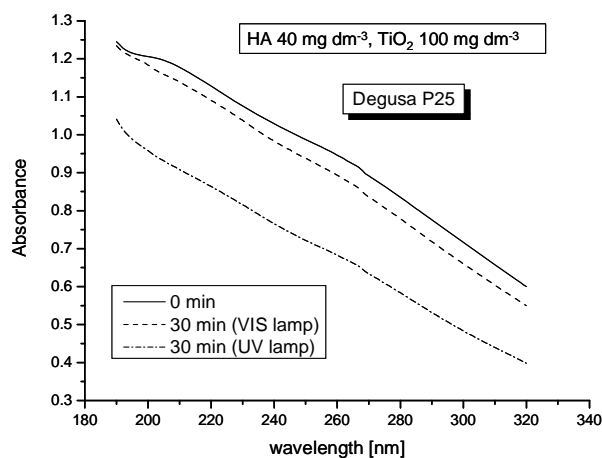
1. Effective Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment

Projekt badawczy EEA PL0084 NOMRemove [2007-2010]

(kierownik projektu: doc. Piotr Warszyński)

Reaktor do testowania aktywności fotokatalitycznej substancji półprzewodnikowych w postaci sproszkowanej w zakresie promieniowania widzialnego i ultrafioletowego

Woda z naturalnych źródeł, przed użyciem w gospodarstwie domowym, w rolnictwie lub w przemyśle musi być w większości przypadków uzdatniana. Jednym z najtrudniejszych do usunięcia rodzajów zanieczyszczeń są naturalne substancje organiczne o niskim ciężarze cząsteczkowym (natural organic matter - NOM) tworzące w wodzie roztwory rzeczywiste. Znane metody usuwania tych substancji są bądź to nieefektywne bądź nieopłacalne ekonomicznie. Przedmiotem projektu jest opracowanie metody usuwania NOM z zastosowaniem procesu fotokatalitycznego na TiO_2 w połączeniu z inną metodą: nanofiltracją lub utlenianiem. W 2008 roku skonstruowano i przetestowano nowy aparat do badania aktywności fotokatalitycznej próbek w postaci sproszkowanej. Aparat składa się z dwóch części: jedna z nich umożliwia naświetlanie próbki światłem ultrafioletowym, druga widzialnym. Aparat jest w pełni skomputeryzowany i umożliwia równoczesne badanie dwóch próbek (jednej w świetle widzialnym, drugiej w ultrafioletowym) w szerokim zakresie zmienności temperatury i intensywności mieszania. Badano wpływ takich parametrów jak: rodzaj (UV lub Vis) i intensywność promieniowania, grubość warstwy zawiesiny, czasu naświetlania, stężenia początkowego substancji rozkładanej i stężenia TiO_2 w zawieszynie na efektywność procesu fotokatalitycznego. Następujące substancje były testowane jako substancje modelowe dla NOM: błękit metylenowy, rodamina B, p-chlorofenol, sól sodowa kwasu humusowego, kwas trichlorooctowy i kwas szczawiowy. Testowano pod kątem zastosowania w procesie fotokatalitycznym wiele różnych preparatów TiO_2 , zarówno handlowych jak i przygotowanych w laboratorium. Obecnie trwają prace nad skonstruowaniem aparatu do testowania preparatów TiO_2 naniesionych na powierzchnię membrany filtracyjnej, co umożliwi testowanie metody oczyszczania z równoczesnym zastosowaniem nanofiltracji i rozkładu fotokatalitycznego.



Rys. 1 Porównanie szybkości rozkładu kwasu humusowego (sól sodowa kwasu humusowego, 40 mg dm⁻³) w obecności zawiesiny TiO_2 (Degussa P25, 50 m²/g, stężenie TiO_2 w zawieszynie 100 mg dm⁻³) pod wpływem promieniowania widzialnego i ultrafioletowego. W przypadku promieniowania ultrafioletowego obserwuje się znaczący ubytek stężenia kwasu humusowego, podczas gdy w przypadku promieniowania widzialnego ubytek ten jest nieznaczny.

2. Establishing Standards for Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood

Projekt badawczy EEA PL0084 [2007-2010]
(kierownik projektu: doc. 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 Światowego 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. Najgroźniejsze wynikają z wprowadzenia do wnętrza budowli zabytkowych systemów grzewczych niesprzyjających konserwacji. Głównym celem projektu jest precyzyjne i ilościowe ustalenie wielkości fluktuacji parametrów powietrza bezpiecznych dla drewnianych powierzchni polichromowanych. Podstawowym narzędziem badawczym jest bezpośrednie monitorowanie odspojień warstw dekoracyjnych od drewnianego podłoża i ich uszkodzeń mechanicznych przy zastosowaniu metod optycznych, emisji akustycznej i modelowania komputerowego.

W drugim roku projektu dokonano koniecznej do prowadzenia badań rozbudowy urządzeń pomiarowych. Ponieważ mechaniczne właściwości drewna i warstw dekoracyjnych zależą od temperatury i zawartości wody w materiale, zbudowano komory klimatyczne kontrolujące te parametry podczas testów mechanicznych. Zmodyfikowano również oprogramowanie tak, aby możliwa była automatyczna kontrola parametrów powietrza podczas pomiarów.

Przeprowadzono szeroko zakrojony program pomiarów mechanicznych właściwości materiałów. W różnych warunkach mikroklimatycznych, dla zaprawy malarskiej i drewna zostały wyznaczone następujące parametry mechaniczne: moduły elastyczności, granice plastyczności, krytyczne odkształcenia prowadzące do zerwania. Zmierzono również odpowiedzi metryczne materiałów wywołane skokową zmianą wilgotności względnej, oraz współczynniki dyfuzji dla różnych gradientów wilgotności względnej i różnych temperatur. Program pomiarów deformacji desek spowodowanych asymetryczną dyfuzją pary wodnej został rozszerzony o przypadek próbek, których jedna strona była pokryta warstwą zaprawy malarskiej. W ten sposób uzyskano dodatkowe informacje na temat metrycznej odpowiedzi każdego z materiałów na niejednorodny rozkład wilgoci, jak również na temat dynamicznego rozkładu sił na styku materiałów tworzących próbkę. Równocześnie rozwinięto modelowanie komputerowe symulujące odpowiedź wielowarstwowej struktury imitującej drewno polichromowane na zmiany temperatury i wilgotności w jej otoczeniu.

Rozpoczęto program monitorowania polichromii na drewnie w zabytkowych kościołach. Pierwszym badanym obiektem był średniowieczny ołtarz w drewnianym kościele w Hedalen w Norwegii. W przeprowadzonych badaniach wykorzystano urządzenie do pomiaru emisji akustycznej i przenośny interferometr plamkowy. Analiza stanu zachowania warstwy dekoracyjnej wsparta monitorowaniem poziomu emisji akustycznej pozwoli ocenić wpływ zamontowanego w kościele systemu grzewczego na rozwój uszkodzeń polichromii.

INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE

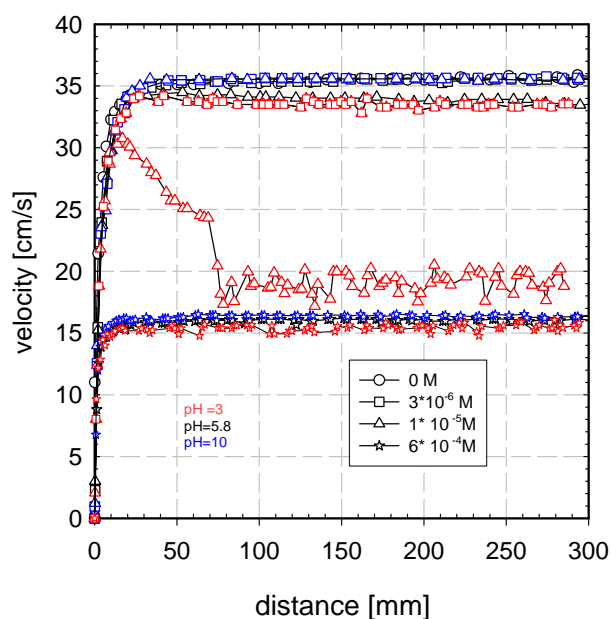
1. Enzymes as Nanotools – Development of a New, Enzyme-Based Technology for Engineering Selectively Preamable, Nano-Structured Membranes

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

Celem projektu jest uzyskanie wyników i zdobycie niezbędnej wiedzy pozwalającej na zastosowanie enzymów jako „nanonarzędzi” do otrzymywania nowych materiałów biomedycznych o nanostrukturze powierzchniowej. Materiały te mogą być wykorzystane jako np. sensory biomedyczne. Jednym z zastosowań może być wytworzenie na bazie enzymów warstw selektywnie przepuszczalnych membran nanostrukturalnych.

W 2008 roku badania koncentrowały się na określeniu wpływu pH na równowagową i dynamiczną aktywność powierzchniową kwasów tłuszczowych, które są produktami enzymatycznej reakcji hydrolizy lipidów i fosfolipazów. Wykazano, że w zależności od pH roztworów kwasów tłuszczowych lub ich form jonowych (jony soli kwasu tłuszczowego) wykazują różną aktywność powierzchniową.

Pomiar parametrów ruchu wypływającego pęcherzyka gazowego (jego prędkości lokalne, deformacja i rozmiar) jest bardzo czułą metodą detekcji niskich ilości związków powierzchniowo aktywnych w roztworze. Ruch pęcherzyka w roztworze substancji powierzchniowo aktywnej prowadzi do wytworzenia nierównowagowego pokrycia jego powierzchni, co wywołuje gradient napięcia powierzchniowego. Gradient ten zależy od aktywności powierzchniowej i stężenia surfaktantów a jego obecność spowalnia ruch



Rys.1. Wykres zależności prędkości wypływającego pęcherzyka od odległości od kapilary (punktu tworzenia bańki).

i identycznym kształcie. Nasze badania dowodzą, że obserwacja ruchu bańki może być czułą metodą detekcji produktów hydrolizy lipidów, biorąc pod uwagę, że obecność kwasów tłuszczowych w roztworze nie zmienia równowagowego napięcia powierzchniowego.

2. IUP Casein Polyelectrolyte Multilayer Films

Projekt badawczy ECO-NET Francja 81/N-ECO-NET/2007/0 IUP [2007-2008]

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Celem projektu jest określenie sposobu tworzenia i właściwości wielowarstwowych filmów polielektrolitowych zawierających wbudowaną α - i β -kazeinę. W celu charakteryzacji miceli kazeinowych ich zeta potencjał oraz wielkość były mierzone w zależności od pH roztworu obydwu form kazeiny. pH było regulowane za pomocą dodatku HCl lub NaOH. Zeta potencjał miceli kazeiny był również mierzony w obecności jonów wapniowych, których stężenie wynosiło 2 i 50 mM.

Budowa multiwarstw polielektrolitowych była prowadzona metodą sekwencyjnej adsorpcji przeciwnie naładowanych polielektrolitów (metoda Layer-by-Layer). Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe były adsorbowane na płytkach krzemowych posiadających warstwę SiO₂. Przed użyciem płytki były myte w roztworze piranii (H₂SO₄:H₂O₂, 1:1), płukane w wrzącej wodzie destylowanej 3 razy i na koniec płukane zimną wodą destylowaną. Jako polianion została użyta polilizyna (PLL) o stężeniu 100 ppm w roztworze buforu HEPES (10 mM, 0.15 M NaCl, pH 7). Jako polikationy została użyta α - i β -kazeina o stężeniu 100 ppm w HEPES. Płukanie było prowadzone w roztworze buforowym. Budowane multiwarstwy składały z trzech warstw PLL i dwóch lub trzech warstw kazeiny (α - lub β -), dając w rezultacie pięć (PLL/KAZ)₂PLL lub sześć (PLL/KAZ)₃ warstw zaadsorbowanych na płytkach krzemowych. Na ostatniej warstwie kazeiny lub PLL adsorbowane były jony Ca²⁺, poprzez zanurzenie płytek krzemowych z filmem polielektrolitowym w roztworze CaCl₂ o stężeniu 2, 20 lub 50 mM. Grubość tak przygotowanych filmów polielektrolitowych była analizowana przy użyciu elipsometru. Filmy polielektrolitowe były także budowane w elipsometrycznej celce przepływowej, co umożliwiało bezpośredni pomiar ich grubości. W ten sposób zostały określone kinetyki adsorpcji filmów polielektrolitowych z kazeiną.

W wyniku przeprowadzonych badań zostało stwierdzone, że obydwie formy kazeiny, w naturalnych i zasadowych roztworach, są ujemnie naładowane, dlatego mogą być użyte razem z biozgodnym polikationem polilizyną (PLL) do konstruowania multiwarstwowych filmów polielektrolit/proteina. Wyniki pomiarów elipsometrycznych kinetyki tworzenia filmów polielektrolitowych na płytkach krzemowych w przepływowej celce elipsometrycznej, wskazują na większy przyrost grubości filmów podczas adsorpcji kazeiny niż polielektrolitu. Wielkość tego przyrostu była zgodna z wielkością molekularną kazeiny i większy przyrost towarzyszył adsorpcji α -kazeiny niż β -kazeiny, co również dobrze odzwierciedla różnicę w molekularnych rozmiarach obu form kazeiny (α -kazeina-9nm, β -kazeina-7 nm). Podobny trend był obserwowany dla filmów badanych na sucho.

Pomiary elipsometryczne oraz pomiary XPS filmów PLL/KAZ z zaadsorbowanymi jonami Ca²⁺ wykazały, że kazeina wiąże jony wapniowe. Większa ich zawartość była obserwowana w filmach (PLL/KAZ)₃ niż w filmach (PLL/KAZ)₂PLL. Wynika to z większej zawartości kazeiny w filmach (PLL/KAZ)₃.

4. Nanostructural micro/mesoporous materials as new catalysts for the production of environmentally friendly diesel fuel

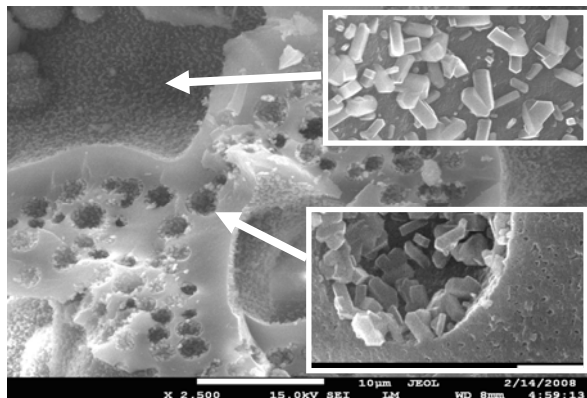
Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Hiszpanii HISZPANIA/139/2006 [2007-2009]

(kierownik projektu: doc. Mirosław Derewiński)

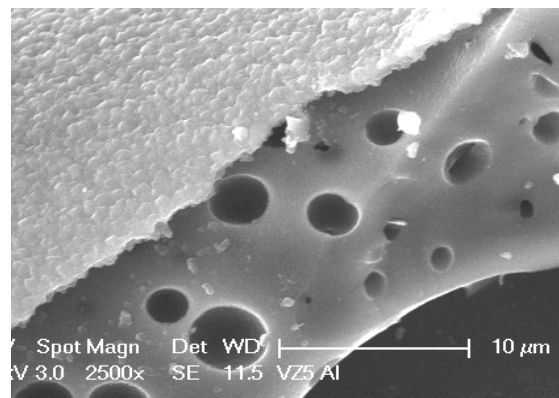
Celem projektu jest przygotowanie nowego materiału o hierarchicznej strukturze porowatej, tj. mikro-/mezo-/makroporowatego, i kontrolowanej wielkości porów, jako nośnika katalizatora dwufunkcyjnego. Katalizatory tego typu mogą znaleźć zastosowanie w hydrokrakingu ciężkich parafin (wosków) powstających podczas procesu Fishera-Tropscha. Materiałem wyjściowym w preparatyce nowych układów są amorficzne, krzemianowe i glinowkrzemianowe monolity posiadające rozwinięty system mezo-/makroporów. Procedura ich syntezy pozwala na modelowanie rozmiarów i kształtu monolitów, które mogą być bezpośrednio wykorzystane jako złoża katalityczne, co eliminuje kosztowny i czasochłonny etap formulacji ziaren katalizatora konieczny w przypadku preparatów proszkowych. Wyjściowe monolity otrzymano stosując organiczne matryce o różnej wielkości cząsteczek, tj. glikol polietylenowy oraz bromek cetyltrimetyloamoniowy. Po impregnacji roztworem organicznego szablonu, wymaganego do wygenerowania danej struktury zeolitowej, proces częściowej rekrystalizacji monolitu prowadzono w warunkach hydrotermalnych.

W przypadku rekrystalizacji monolitów czystokrzemianowych zastosowana procedura prowadzi do utworzenia bardzo drobnych kryształów silikalitu-1 (struktura MFI) rozproszonych równomiernie na powierzchni ścianek makroporów monolitu. Takie same niewielkie kryształy znaleziono również we wnętrzu kulistych komór obecnych w ściankach. Komory te są dostępne dla cząsteczek organicznego szablonu (wodorotlenku tetrapropyloamoniowego) poprzez rozwinięty system mezoporów pomiędzy ultradrobnyymi ziarnami SiO_2 tworzącymi szkielet monolitu (Rys. 1). Wykazano, że w przypadku wykorzystania monolitów glinowkrzemianowych, zastosowanie analogicznych warunków syntezy prowadzi wyłącznie do powstania cienkiego filmu zeolitowego pokrywającego równomiernie ścianki makroporów (Rys. 2). Brak mezoporów w ściankach wyjściowego monolitu glinowkrzemianowego odpowiada za brak fazy zeolitowej we wnętrzu kulistych komór wewnątrz ścianek.

Przeprowadzone badania pozwoliły na zaproponowanie częściowej rekrystalizacji uformowanych wstępnie monolitów, jako efektywnej metody generowania fazy zeolitowej typu MFI, przy równoczesnym zachowaniu wyjściowej porowatości monolitów. Różnice w ich budowie, wynikające z ich różnego składu chemicznego, mają decydujący wpływ na postać i miejsce lokalizacji fazy zeolitowej w strukturze monolitów.



Rys. 1. Zdjęcie SEM monolitu krzemianowy po rekrystalizacji: kryształy silikalitu-1 osadzone są zarówno na ściankach makroporów jak i we wnętrzu komór obecnych w ściankach.



Rys. 2. Ciągła warstwa kryształów zeolitu ZSM-5, osadzona na powierzchni ścianek makroporów monolitu glinowkrzemianowego

5. The development of a substitute Ru catalyst based on Ni catalyst by improving resistance for carbon deposition and Ni sintering

Projekt badawczy NANO Japonia [2007-2008]

(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)

Projekt został zakończony w styczniu 2008 roku i zamknięty merytorycznie na podstawie sprawozdania za rok 2007.

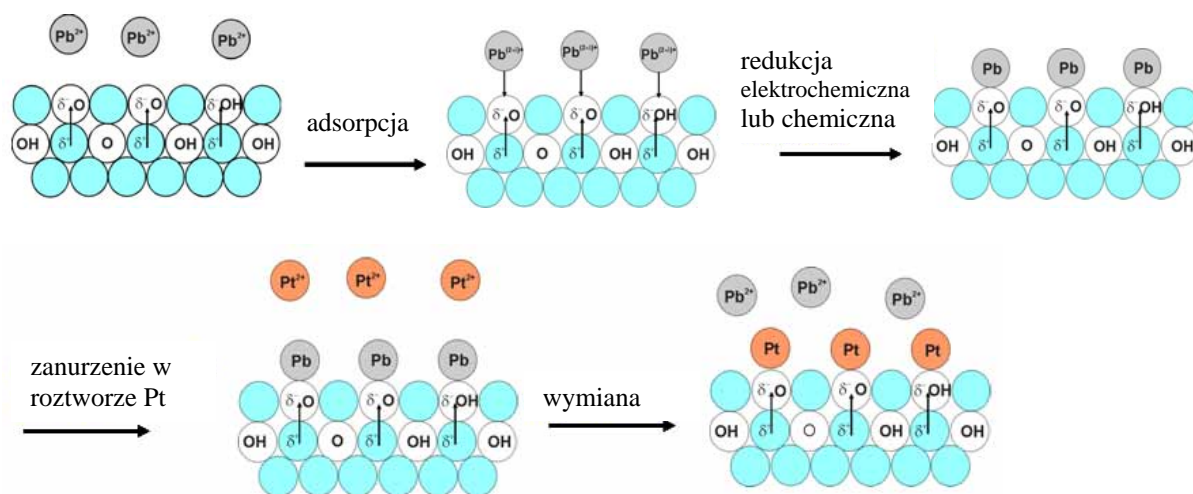
W roku 2008 w ramach projektu sfinansowany został jeden wyjazd do Japonii w celu wzięcia udziału w seminarium sprawozdawczym. Prof. Ewa Broclawik przebywała w Japonii w ramach umowy w okresie od 18 do 25 stycznia 2008, gdzie przeprowadzone zostały następujące rozmowy i konsultacje:

1. 18.01 do 20.01: dyskusje w ramach konsultacji prac prowadzonych w grupie prof. Akiry Miyamoto, Tohoku University, New Industry Creation Hatchery Center(NICHe) & Department of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering, Sendai, Japan
2. 21.01 do 25.01: wizyta w oddziale Renaissance Energy Research Corporation (RER) w Osace oraz workshop na temat współpracy międzynarodowej w ramach projektu NEDO, Osaka, 24.01.2008

7. Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO₂ and Pt-Rh-SnO₂ Electrocatalysts for Ethanol Oxidation

współpraca nieformalna IKiFP PAN i Brookhaven National Laboratory, Upton, NY
(dr Andrzej Kowal)

W celu potencjalnego zastosowania w katalizie i elektrokatalizie (ogniwach paliwowych) zsyntezowano i zbadano właściwości koloidów oraz nanoklasterów metalicznych charakteryzujących się wąskim przedziałem wielkości ziaren. Badano nanoklaster Pt, Pt-Rh oraz analogiczne nanoklaster pokryte nanocząstkami SnO₂ jako materiały na anody w ogniwie paliwowym zasilanym etanolem (Direct Ethanol Fuel Cell). W pierwszym etapie pracy poprzez programowane wygrzewanie odpowiednich wodorotlenków koloidalnych w roztworze glikolu etylenowego otrzymano stabilne klaster Pt, Pt-Rh oraz nanocząstki SnO₂ nie stosując żadnych dodatkowych związków zabezpieczających powierzchnie nanoobjektów. W drugim etapie stosowano opracowaną przez Adzica (Adzic et al. Patent Application 2007) metodę adsorpcji kationu, następnie redukcji galwanicznej i wymiany metalu osadzonego na powierzchni tlenku przez metal bardziej szlachetny. W metodzie tej kationy ołowiu są adsorbowane na powierzchni SnO₂ w roztworze o pH>4, to jest powyżej punktu zerowego ładunku. Zaadsorbowane jony Pb²⁺ są redukowane do metalu a następnie wymienione na atomy np. platyny po zanurzeniu w roztworze zawierającym jony Pt²⁺. Ten proces ułatwia kontrolowane osadzanie atomów metalu na powierzchni tlenku. Pt może być osadzona na powierzchni SnO₂, podczas gdy drugi metal - Rh może być osadzony bądź na SnO₂, lub na Pt. Osadzenie Rh na Pt wymaga uprzedniego galwanicznego osadzenia atomów Cu a następnie wymiany ich na Rh.



Rys. 1. Ilustracja metody osadzania atomów Pt na tlenku metodą adsorpcji kationu, następnie redukcji galwanicznej i wymiany metalu osadzonego na powierzchni tlenku przez metal bardziej szlachetny.

Wielkość ziaren oraz aktywność nanokatalizatora została określona odpowiednio techniką TEM oraz woltammetrią cykliczną.

PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE

1. TECHKON Wdrożenie technologii cementów romańskich do praktyki konserwatorskiej

Projekt SPO-WKP 1.4.1. [2005-2008] TECHKON
(kierownik projektu: doc. Roman Kozłowski)

Celem projektu zakończony 31 maja 2008 było wprowadzenie do praktyki konserwatorskiej cementów romańskich, spoiw stosowanych w okresie XIX i początku XX wieku do łatwego i ekonomicznego wytwarzania sztukaterii na elewacjach budynków. Umożliwi to właściwą konserwację ogromnego zasobu zabytków architektury miejskiej z tego okresu. Technologię wytwarzania tych materiałów przywrócono w ramach projektu ROCEM finansowanego przez Komisję Europejską w 5. Programie Ramowym. Obecny projekt został zrealizowany przez konsorcjum utworzone przez przedsiębiorstwo konserwatorskie AC Konserwacja Zabytków Piotrowski, Kosakowski Spółka Jawna i instytut.

W okresie sprawozdawczym, obejmującym 5 ostatnich miesięcy projektu, zrealizowano dwa zadania dodatkowe, znacząco poszerzające informacje potrzebne do stosowania cementów romańskich w praktyce konserwatorskiej: przebadano wpływ preparatów hydrofobizujących na hydratację zapraw opartych na cementach romańskich oraz wpływ przebiegu hydratacji na adhezję zapraw naprawczych.

Impregnacja elewacji budynków preparatami hydrofobizującymi jest ważnym zabiegiem konserwatorskim, gdyż chroni elewację przed wnikaniem wody opadowej, szczególnie przed wypłukiwaniem przez wodę opadową wolnego wodorotlenku wapna, który powoduje nieestetyczne zabielenia elewacji. Zakończono badania nad wpływem zabiegu hydrofobizacji na przebieg hydratacji zapraw przy zastosowaniu różnych środków hydrofobizujących. Stwierdzono, że mikroemulsja silikonowa w wodzie nakładana na świeżą powierzchnię zaprawy powoduje utrudnienie reakcji hydratacji, a w warunkach skrajnych może ją całkowicie zablokować. Natomiast preparaty hydrofobizujące dodawane do zaprawy w trakcie jej przygotowania nie wprowadzają negatywnych zaburzeń w procesie hydratacji. Stąd preferowana strategia postępowania konserwatorskiego powinna zakładać zabezpieczenie hydrofobowe napraw przez odpowiednie dodatki do zapraw naprawczych, natomiast hydrofobizacja całej elewacji może nastąpić dopiero po zaawansowaniu procesu dojrzewania napraw w warunkach ich prawidłowej pielęgnacji.

Stwierdzono, że siła adhezji zaprawy naprawczej do oryginału znacząco zależy od stosunku wody do cementu. Adhezja naprawy silnie zależy również od nasycenia podłoża wodą. W przypadku konieczności uzupełnienia dużych ubytków lub rekonstrukcji masywnych elementów, zaprawę naprawczą nakłada się warstwami „świeże-na-świeże”. Zagadnienie to przebadano systematycznie dla zapraw romańskich mierząc adhezję jako siłę odrywania w funkcji czasu pomiędzy nałożeniem kolejnych warstw zaprawy. Stwierdzono, że przyczepność kolejnej warstwy zmniejsza się z wydłużaniem czasu, po którym ją nałożono, szczególnie, jeżeli czas ten przekracza około 20 minut. Jest to związane z powstawaniem gładkiej, zwartej struktury szklistej na powierzchni stwardniałego podłoża, która działa jak warstewka rozdzielająca.



2. CEZAŚ Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska

Projekt SPO-WKP 1.4.2. [2005-2008] CezaŚ
(kierownik projektu: mgr Janusz Janas)

W maju 2008 zakończono realizację projektu WKP_1/1.4.2/2/2005/9/90/294/2006 „Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska (CEZAŚ)”, który był realizowany od 1 lipca 2006. W części przypadającej na 2008 rok dokonano zakupu chromatografu cieczonego LCMS-2010 EV w wersji UFLC z autosamplerem, firmy Shimadzu. Przyrząd umożliwia szybką analizę wysokowrzących oraz tzw. nielotnych substancji organicznych zaliczanych do zanieczyszczeń środowiska, takich jak, wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne, pestycydy i herbicydy, oleje transformatorowe oraz polichlorowane bifenyle.

Stworzono system zarządzania jakością w laboratorium zgodny z normą PN-EN ISO/IEC 17025:2005. Opracowano dokumentację systemu zarządzania jakością, która obejmuje między innymi:

- Politykę jakości,
- Deklarację jakości,
- Księgę Jakości, podstawowy dokument systemu zarządzania jakością
- Procedury Ogólne (10),
- Procedury Badawcze (6) i Instrukcje Działania (10),
- instrukcje obowiązujące w IKiFP PAN między innymi: stanowiskowe oraz dotyczące zagadnień BHP, p.poż.

Na podstawie przygotowanej dokumentacji złożono wniosek o akredytację do Polskiego Centrum Akredytacji.

W omawianym okresie sprawozdawczym laboratorium CezaŚ zrealizowało:

1. 7 zleceń zewnętrznych na łączną kwotę 22 326 zł (18 300 + VAT), w tym ekspertyzę środowiskową dla budynku i gruntu (na podstawie pomiarów własnych i podzleconych) dla Banku PKO SA w Warszawie. Zlecenia obejmowały pomiary:
 - konwersji lotnych zanieczyszczeń organicznych w zakładach przemysłowych,
 - skuteczności oczyszczania gazów odlotowych,
 - stężenia i składu chemicznego zanieczyszczeń organicznych,
 - charakterystyki procesu adsorpcji-desorpcji,
 - emisji gazowych zanieczyszczeń organicznych oraz sprawności rewersyjnych reaktorów katalitycznych.
2. 13 zleceń wewnętrznych z IKiFP PAN, obejmujących 16 różnych serii pomiarowych metodami:
 - chromatografii gazowej z detekcją masową,
 - spektroskopii w podczerwieni w całym zakresie badawczym (tj. bliskiej, środkowej i dalekiej podczerwieni) z wykorzystaniem przystawek DRIFT i ATR oraz metodą transmisyjną,
 - EDXRF – fluorescencji rentgenowskiej z dyspersją energii.

3. IGNIS Konserwatorskie systemy grzewcze dla zabytkowych kościołów

Projekt SPO-WKP 1.4.1. [2005-2008] IGNIS

(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)

Podstawowym celem projektu jest wdrożenie do praktyki konserwatorskiej systemu ogrzewania zabytkowych kościołów, który z jednej strony będzie ogrzewał przebywających w nich ludzi, a z drugiej służył ochronie obiektów i ich wyposażenia. System taki powinien dostarczać ciepło:

- - lokalnie do stref, gdzie przebywają ludzie, i jak najmniej zaburzać mikroklimat w pozostałej części wnętrza,
- - selektywnie, za pomocą promieniowania podczerwonego, do powierzchni architektonicznych zagrożonego kondensacją wilgoci.

Projekt jest realizowany przez konsorcjum utworzone przez przedsiębiorstwo konserwatorskie Monument Service – Marcin Kozarzewski i Instytut.

Praca zespołu badawczego, w ostatnich czterech miesiącach projektu skupiona była na czterech głównych działaniach badawczych.

W pierwszym, zdefiniowano specyfikacje techniczną układu kontroli systemu ogrzewania ze szczególnym uwzględnieniem ekonomiczności i łatwości instalacji w zabytkowych kościołach. Zgodnie z nimi, wybrano elementy dostępne na rynku, które zostały zintegrowane w jeden układ a następnie oprogramowane zgodnie z wypracowaną w pierwszej fazie projektu zasadą działania.

Opracowany układ kontroli został przetestowany w laboratorium przez symulację ogrzewania i epizodów kondensacji. W końcu, układ kontroli jak i system ogrzewania został zainstalowany i przetestowany w rzeczywistych warunkach obiektu zabytkowego – kościele p.w. Wniebowzięcia NMP w Skępem. Wyniki otrzymane udowodniły, że zastosowane urządzenia są skuteczne i pracują w sposób stabilny.

W drugim pakiecie zadań, cały system ogrzewania został przebadany pod kątem efektywności ogrzewania i zaburzenia naturalnego mikroklimatu kościoła. Do tego celu użyto kamery podczerwonej, pirometru, termometru kulistego jak i standardowych czujników temperatury i wilgotności względnej. Uzyskane rezultaty pokazały, że zastosowany system grzewczy zapewnia komfort cieplny na akceptowalnym poziomie. W czasie epizodów grzewczych zaburzenie najbardziej kluczowego parametru, jakim jest wilgotności względnej pozostawało wewnątrz obszaru bezpiecznego określonego przez 84 percentyl fluktuacji naturalnych zarejestrowanych w długo-okresowym monitoringu kościoła. Stwierdzono, że kilka prób włączenia ogrzewania zostało zablokowanych przez układ sterujący z powodu zbyt niskiej wilgotności względnej wynikającej z niskiej wilgotności absolutnej powietrza zewnętrznego.

W trzecim pakiecie zadań, promienniki podczerwieni zapobiegające kondensacji były przebadane przez symulowanie epizodów kondensacji w warunkach obiektu referencyjnego. Następnie monitorowano ich pracę w okresie styczeń-kwiecień 2008. W czasie tego okresu ryzyko kondensacji spowodowane wydzielaniem wody przez dużą liczbę osób biorących udział w nabożeństwach aktywowało pracę systemu przeciwdziałającego kondensacji tylko raz. Uruchomiony system dostarczył ciepło do sklepienia, tak że różnica temperatur między sklepieniem a temperatura punktu rosy wynosiła 0,5 stopnia.

System wykazał skuteczność w zabezpieczeniu powierzchni architektonicznych przed kondensacją.

W czwartym pakiecie zadań, cały system został zoptymalizowany i przebadany przy użyciu kamery podczerwieni zapewniając środowisko konserwatorskie i właściciela obiektu, o skuteczności zastosowanych rozwiązań przed negatywnym wpływem środowiska.

4. MPD Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures

SPO IG 1.1.2. [2008-2012] MPD

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Projekt jest koordynowany przez Akademię Górniczo-Hutniczą we współpracy z którą jest realizowany. 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 Institut 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).

Projekt jest realizowany od 1 listopada 2008 r., a jego celem jest wypromowanie 12 prac doktorskich w ramach 12 indywidualnych projektów naukowych. Rekrutacja doktorantów odbywa się w drodze otwartego konkursu. Pierwszy konkurs odbył się w 2008 r., drugi jest przewidziany na wiosnę 2009 r.

WSPÓLPRACA Z INNYMI INSTYTUCJAMI I PRZEMYSŁEM W ROKU 2008

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 roku 2008 przeprowadzono szereg badań i ekspertyz dla różnych podmiotów gospodarczych, w których Instytut rozwiązuje problemy związane z oczyszczaniem gazów produkcyjnych emitowanych do atmosfery, m.in.: dla Eko-Dom Sp. z o.o. w Łomży.

Prace te prowadzone są w ścisłej współpracy ze Spółką z o.o. "Katalizator" w Krakowie, która jest m.in. producentem opracowywanych przez Instytut katalizatorów (w skali przemysłowej) dla potrzeb produkowanych i eksploatowanych instalacji oczyszczających.

W 2006 roku zostało utworzone, dzięki finansowaniu z funduszy Sektorowych Programów Operacyjnych, nowe laboratorium "Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CEZaŚ", którego zadaniem jest prowadzenie pomiarów i badań z zakresu ochrony środowiska na rzecz podmiotów gospodarczych i instytucji. Laboratorium CEZaŚ w roku 2008 wykonało:

- pomiary konwersji LZO emitowanych z Wydziału Formy Suche II w Zakładach Farmaceutycznych Pliva S.A. w Krakowie
- pomiary skuteczności oczyszczania gazów odlotowych przez instalację adsorpcyjno-katalityczną ADTERM-S 50000m³/h w firmie Siemens SA we Franstat, Czechy
- pomiary stężenia i składu lotnych zanieczyszczeń organicznych (LZO) emitowanych w linii druku fleksograficznego oraz pomiarów sprawności rewersyjnego reaktora katalitycznego w Zakładach YANKO Sp. z o.o. w Rzeszowie
- pomiary emisji LZO z emitorów wydziału FORMY II w ICN Polfa Rzeszów SA
- pomiary konwersji LZO z emitera Wydziału Formy Suche I w Zakładach Farmaceutycznych Pliva S.A. w Krakowie

- pomiary sprawności instalacji adsorpcyjno-katalitycznej w Zakładach Continental Automotive Systems we Franstat, Czechy

Dla Banku Polska Kasa Opieki S.A. w Warszawie wykonano ekspertyzę Środowiskową budynku i gruntu nieruchomości położonej przy ul. Bohaterów Września 80 w Krakowie

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 2008 roku wykonywano prace m.in. nad następującymi ekspertyzami:

- dokumentacja konserwatorska zawierająca ocenę zagrożeń podziemi Katedry Metropolitalnej na Wawelu
- analiza mikroklimatu grotu Św. Pawła w Efezie i opracowanie koncepcji ograniczenia kondensacji wody na znajdujących się w jej wnętrzach wczesnochrześcijańskich freskach (ekspertyza na rzecz Austriackiej Misji Archeologicznej w Efezie)
- diagnoza przyczyn uszkodzeń mechanicznych zabytkowej skrzyni z laki japońskiej, tzw. 'Mazarin chest' ze zbiorów Muzeum Wiktorii i Alberta w Londynie (ekspertyza na rzecz Muzeum w ramach wieloletniego programu badań i konserwacji skrzyni)

3. Inne opracowania i badania

- badania właściwości fizykochemicznych próbek przemysłowych tlenków molibdenu dla ChemieMetall GmbH w Bitterfeld (Niemcy)
- Amyltetrahydroanthraquinone Formation with Palladium-polyaniline-silica Catalyst - Hydrogen Peroxide Amylanthraquinone Process, Study of Working Solution Chemistry in Deep Hydrogenation Conditions dla Solvay S.A. Brussels (Belgia)
- badania właściwości powierzchniowych nowoczesnych materiałów do produkcji form odlewniczych dla Instytutu Odlewnictwa w Krakowie
- synteza próbek lateksów polistyrenowych o ściśle zdefiniowanych właściwościach powierzchniowych dla Instytutu Biotechnologii Surowic i Szczepionek SA w Krakowie
- synteza i charakteryzacja nanocząstek srebra dla NanoLab Sp. z o.o.
- wykonanie próbek katalizatorów heterogenicznych wraz z ich analizą fizykochemiczną dla Instytutu Ciężkiej Syntezy Organicznej w Blachowni Śląskiej
- pomiary XPS oraz ich analiza dla 8 próbek modyfikowanych krzemionek dla Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN
- pomiary widm fotoelektronowych wolframianów miedzi i wybranych metali ziem rzadkich dla Politechnika Szczecińska
- badania techniką AFM próbek polimerów dla Zakładów Azotowych Tarnów SA
- badania mikrostruktury i składu chemicznego w mikroobszarach połączeń lutowniczych w zmontowanych układach elektronicznych dla Fideltronik IMEL Sp. z o.o.
- badania próbek połączeń lutowanych pakietów elektronicznych metodą elektronowej mikroskopii skaningowej i mikroanalizy rentgenowskiej dla Fideltronik IMEL Sp. z o.o.
- badania skaningowe dla próbek SiO₂ dla VARIAN R&D Consumable Products
- badania skrobi modyfikowanej metodami SEM i EDS dla Katedry Chemii Uniwersytetu Rolniczego w Krakowie
- badania próbek barwników na mikroskopie skaningowym dla Zakładu Fizyki Medycznej Instytutu Fizyki UJ

- pomiary metodą skaningowej mikroskopii elektronowej próbek glinianu wapnia dla Wydziału Chemii UJ
- badania mikrostruktury i składu chemicznego w mikroobszarach 24 próbek geologicznych metodami SEM i EDS dla Instytutu Nauk Geologicznych PAN
- 2 ekspertyzy próbek farb dla Sądu Rejonowego dla Krakowa-Śródmieścia

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2008

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

PRACE PRZEGLĄDOWE I ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Nattich "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous Surfaces", in: "Highlights in Colloid Science" (D.Platikanov, D.Exeroowa, Eds.), Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2009, pp 203-227 [ISBN 978-3-527-32037-0] (wydrukowano w 2008)
2. Z.Adamczyk, P.Weroński, J.Barbasz "Formation of Multilayered Structures in the Layer by Layer Deposition of Colloid Particles", J. Colloid Interface Sci., 317 (2008) 1-10
3. A.Burkat-Dulak, L.Lityńska, M.Derewiński "Preparation of Bifunctional Catalysts", in: "Advances Micro- and Mesoporous Materials" (K.Hadjiivanov et al., Eds.), Heron Press, Sofia 2008, p.286-294 [ISBN 978-954-580-239-3]
4. V.Cortés Corberán, B.Sulikowski "Vanadium-Containing Mesoporous Molecular Sieves: Synthesis, Properties and Catalytic Performance in Oxidative Activation of Light Alkanes", Polish J. Chem., 82 (2008) 1823-1837
5. R.Grabowski, M.Śliwa, E.M.Serwicka, J.Skrzypek "Synteza eteru dimetylowego z gazu syntezowego", in: "Czysta energia, produkty chemiczne i paliwa z węgla - ocena potencjału rozwojowego", Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla, Zabrze 2008, p.270-280 ISBN 978-913434-6-3]
6. J.Haber "Fundamentals of Hydrocarbons Oxidation", in: "Handbook of Heterogeneous Catalysis" (G.Ertl et al., Eds.), Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2008, p.3359-3384 [ISBN 978-3-527-31241-2]
7. J.Haber, J.H.Block, B.Delmon "Methods and Procedures for Catalysts Characterization", in: "Handbook of Heterogeneous Catalysis" (G.Ertl et al., Eds.), Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2008, p.1230-1258 [ISBN 978-3-527-31241-2]
8. Y.Jiang, B.Travis, C.Knutson, J.Zhang, P.Weroński "Numerical Methods for Protocell Simulations", in: "Protocells: Bridging Nonliving and Living Matter" (S.Rasmussen et al., Eds.) MIT Press, Cambridge 2008, p.125-155 [ISBN 978-0-262-18268-3]
9. M.Kolasińska, R.Krastev, T.Gutberlet, P.Warszyński "Swelling and Water Uptake of PAH/PSS Polyelectrolyte Multilayers", in: "Surface and Interfacial Forces – from Fundamentals to Applications" (G.K.Auernhammer et al., Eds.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2008, p.30-38 [ISBN 978-3-540-68018-5]
10. A.Pacula, R.Mokaya "Porous Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition Using As-Synthesised Zeolites as Template: Synthesis and Hydrogen Storage Properties", in: "Nanoporous Materials" (A.Sayari, M.Jaroniec, Eds.), World Scientific Publ. Co., Singapore 2008, p.283-292

11. V.Pashkova, K.Góra-Marek, L.Lityńska, M.Derewiński "Preparation of New Acid-Type Catalysts Containing Nanoclusters of Zeolites (FAU, BEA) Dispersed in the Amorphous Porous Matrix", in: "Advances Micro- and Mesoporous Materials" (K.Hadjiivanov et al., Eds.), Heron Press, Sofia 2008, p.270-277 [ISBN 978-954-580-239-3]
12. S.Rasmussen, J.Bailey, J.Boncella, L.Chen, G.Collis, S.Colgate, M.DeClue, H.Fellermann, G.Goranovic, Y.Jiang, C.Knutson, P.A.Monnard, F.Mouffouk, P.Nielsen, A.Sen, A.Shreve, A.Tamulis, B.Travis, P.Weroński, J.Zhang, X.Zhou, H.Ziock, W.Woodruff "Assembly of a Minimal Protocell", in: "Protocells: Bridging Nonliving and Living Matter" (S.Rasmussen et al., Eds.) MIT Press, Cambridge 2008, p.407-431 [ISBN 978-0-262-18268-3]
13. M.Szaleniec "Sieci Neuronowe i regresja wieloraka – czyli jak okiełznać złożoność w badaniach naukowych", in: "Zastosowania statystyki i data mining w badaniach naukowych" (J.Wątroba, ed.), StatSoft, Kraków 2008, p.69-86 [ISBN 978-83-88724-40-4]

ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O CYRKULACJI MIĘDZYNARODOWEJ

1. Z.Adamczyk, J.Barbasz "Irreversible Adsorption of Particles on Surface Features of a Circular and Rectangular Shapes", *Adsorption Sci. Technol.*, 25 (2007) 463-472 (published in 2008)
2. Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Nattich "Particle Assembly on Patterned Surfaces Bearing Circular (dots) and Rectangular (stripes) Surface Features", *Langmuir*, 24 (2008) 1756-1762
3. E.Banach, P.Kozyra, P.Rejmak, E.Broclawik, J.Datka "Cobalt Cationic Sites in Ferrierites: QM/MM Modeling", *Catal. Today*, 137 (2008) 493-497
4. A.Bielański, A.Małecki, A.Lubańska, E.Diemann, H.Bogge, A.Müller "The Behaviour of NH_4^+ in a Water Nanodrop Encapsulated within a Highly Charged Porous Metal-Oxide Nanocontainer: a Thermoanalytical Study", *Inorg. Chem. Commun.*, 11 (2008) 110-113
5. T.Biswick, W.Jones, A.Pacuła, E.Serwicka, J.Podobiński "Evidence for the Formation of Anhydrous Zinc Acetate and Acetic Anhydride during the Thermal Deradation of Zinc Hydroxy acetate, $\text{Zn}_5(\text{OH})_8(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ to ZnO ", *Solid State Sci.*, (2008) (available on-line)
6. T.Borowski, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "Reaction Mechanism of Apocarotenoid Oxygenase (ACO). A DFT Study", *Chem. Eur. J.*, 14(2008) 2264-2276
7. A.Burkat-Dulak, M.Derewiński "Preparation of MFI Type Zeolite with Hierarchical Pores System as New Supports for Deposition of Metal Clusters", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 174A (2008) 149-154
8. A.Burkat-Dulak, V.Pashkova, W.Pudło, E.Włoch, A.Jarzębski, M.Derewiński "Nanomaterials with a Multimodal Pore Structure Based on the MFI-Type Zeolite", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1809-1822
9. M.Derewiński, K.Góra-Marek, K.Lazar, J.Datka "Nature of Active Sites in the Fe-TON Zeolites: Mössbauer and IR Studies", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 174B (2008) 865-868

10. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, W.Stanuch, J.W.Sobczak, A.Bukowska, W.Bukowski "Diamine Functionalized Gel-Type Resin as a Support for Palladium Catalysts. Preparation, Characterization and Catalytic Properties in Hydrogenation of Alkynes", *React. Funct. Polymer*, 68 (2008) 1650-1662
11. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, A.Waksmundzka-Góra, A.Bukowska, W.Bukowski, J.Noworól "Functional Gel-Type Resin Based Palladium Catalysts. The Role of Polymer Properties in the Hydrogenation of C=C in Isomers, Maleic and Fumaric Acids", *React. Funct. Polymer*, 68 (2008) 1059-1071
12. A.Drelinkiewicz, J.W.Sobczak, E.Sobczak, M.Krawczyk, A.Zięba, A.Waksmundzka-Góra "Physicochemical and Catalytic Properties of Pt-poly(4-Vinylpyridine) Composites", *Mater. Chem. Physics*, (2008) (available on line)
13. A.Drelinkiewicz, A.Zięba, A.Król, J.W.Sobczak, M.Grzywa "Polyaniline Supported Pd and Pt Catalysts. Role of Polymer Matrix in the Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1717-1732
14. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Waksmundzka-Góra, A.Drelinkiewicz, Z.Olejniczak "Immobilization of Cationic Ruthenium(II) Complex Containing the Hemilabile Phosphoallyl Ligand in Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Application of this Material as Hydrogenation Catalyst", *J. Organ. Chem.*, 693 (2008) 510-518
15. S.Dźwigaj, J.Janas, J.Gurgul, R.P.Socha, T.Shishido, M. Che "Do Cu(II) Ions Need Al Atoms in Their Environment to Make CuSiBEA Active in the SCR of NO by Ethanol or Propane? A Spectroscopy and Catalysis Study", *Appl. Catal. B*, (2008) (available on-line)
16. S.Dźwigaj, J.Janas, W.Rojek, L.Stievano, F.E.Wagner, F.Averseng, M.Che "Effect of Iron Impurities on the Catalytic Activity of BEA, MOR, and MFI Zeolites in the SCR of NO by Ethanol", *Appl. Catal. B*, (2008) (available on-line)
17. S.Dźwigaj, J.Janas, J.Mizera, J.Gurgul, R.P.Socha, M.Che "Incorporation of Copper in SiBEA Zeolite as Isolated Lattice Mononuclear Cu(II) Species and Its Role in Selective Catalytic Reduction of NO by Ethanol", *Catal. Lett.*, 126 (2008) 36-42
18. M.Elzbieciak, M.Kolasińska, P.Warszyński "Characteristic of Polyelectrolyte Multilayers: the Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting Properties", *Colloids Surf. A*, 321 (2008) 258-261
19. Th.Fickenscher, S.Rayaprol, J.von Appen, R.Dronskowski, R.Pöttgen, K.Łątka, J.Gurgul "Crystal Structure, Chemical Bonding and Magnetic Hyperfine Interactions in GdRu²SiC", *Chem. Mater.*, 20 (2008) 1381-1389
20. M.Filek, M.Zembala, H.Hartikainen, Z.Miszalski, A.Kornaś, R.Wietecha-Posłuszny, P.Walas "Changes in wheat Plastid Membrane Properties Induced by Cadmium and Selenium in Presence/Absence of 2,4-Dichloroacetic Acid", *Plant Cell Tissue Organ Culture*, (2008) (available on line)

21. U.Filek, A.Bressel, B.Sulikowski, M.Hunger "Structural Stability and Brønsted Acidity of Thermally Treated $\text{AlPW}_{12}\text{O}_{40}$ in Comparison with $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ", *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008) 19470-19476
22. V.Georgiev, T.Borowski, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "A Comparison of the Reaction Mechanisms of Iron and Manganese-Containing 2,3-HPCD: an Important Spin Transition for Manganese", *J. Biol. Inorg. Chem.*, 13(2008) 929-940
23. B.Gil, J.Janas, E.Włoch, Z.Olejniczak, J.Datka, B.Sulikowski "The Influence of the Initial Acidity of HFER on the Status of Co Species and Catalytic Performance of CoFER and InCoFER in CH_4 -SCR-NO", *Catal. Today*, 137 (2008) 174-178
24. A.Góra, E.Broclawik "Mechanism of Hydrogen Abstraction by O^- Species in Oxidative Dehydrogenation of Early Alkanes: Propane, Ethane and Methane. Model Theoretical DFT Study", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1779-1791
25. R.Gryboś, J.Hafner, L.Benco, P.Raybaud "Adsorption of NO on Pd Exchanged Mordenite: Ab-initio DFT Modeling", *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008) 12349-12362
26. M.Grzywa, W.Nitek, W.Łasocha "Synthesis, Characterization and Crystal Structure of Three Dinuclear Diperoxo Complexes of Mo(VI); $\text{K}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}, \text{NH}_4)\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}$ and $(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}, \text{Na})\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}$ ", *J. Mol. Struct.*, 888 (2008) 318-326
27. M.Grzywa, W.Nitek, W.Łasocha "Synthesis, Characterization and Crystal Structures of Three New Inorganic Dinuclear Diperoxo Complexes of W(VI) and Mo(VI); $\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{WO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\} \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\} \cdot \text{H}_2\text{O}$ and $\text{Cs}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]_2\}$ ", *J. Mol. Struct.*, (2008) (available on-line)
28. M.Grzywa, B.Włodarczyk-Gajda, W.Łasocha "Thermal Decomposition Study of Selected Isopolymolybdates", *J. Thermal Anal. Calorimetry*, (2008) (available on-line)
29. J.Gurgul, K.Łątka, A.W.Pacyna, Y.Verbovytsky, R.Pöttgen "Hyperfine Interactions Studied by ^{119}Sn Mössbauer Spectroscopy in SmRhSn ", *Hyperfine Interactions*, 184 (2008) 33-38
30. J.Haber "Fifty Years of My Romance with Vanadium Oxide Catalysis", *Catal. Today*, (2008) (available on-line)
31. J.Haber "Professor Barbara Grzybowska-Świerkosz", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1681-1685
32. J.Haber, M.Nattich, T.Machej "Alkali-Metal Promoted Rhodium-on-Alumina Catalysts for Nitrous Oxide Decomposition", *Appl. Catal. B*, 77 (2008) 278-283
33. J.Haber, P.Nowak, R.P.Socha, P.Żurek "Preparation of TiO_2 for Photocatalytic Applications – Doping of TiO_2/Ti with Transition Metal Ions", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1753-1766
34. J.Haber, J.Stoch, V.A.Zazhigalov, L.V.Baherikova, E.V.Cheburakova "Selective Oxidation of Light Alkanes on Transition Metal Promoted VPO Catalysts", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1839-1852

35. J.Haber, P.Nowak, P.Żurek "Charge Transfer in Photocatalytic Systems – V and Mo Doped TiO₂/Ti Electrodes ", Catal. Lett., 126 (2008) 43-48
36. D.C.Hughes, D.B.Sugden, D.Jaglin, D.Mucha "Calcination of Roman Cement: a Pilot Study Using Cement-Stones from Whitby", Construction Building Materials, 22 (2008) 1446-1455
37. B.Jachimska, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Characterization of Globular Protein Solutions by Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility, and Viscosity Measurements", Langmuir, 24 (2008) 6866-6872
38. S.Jakiela, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Numerical Modelling of Moisture Movement and Related Stress Field in Lime Wood Subjected to Changing Climate Conditions", Wood Sci. Technol., 42 (2008) 21-37
39. S.Jakiela, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Acoustic Emission for Tracing Fracture Intensity in Lime Wood Due to Climatic Variations", Wood Sci. Technol., 42 (2008)269-279
40. N.-T.H.Kim-Ngan, A.G.Balogh, J.D.Meyer, J.Brotz, S.Hummelt, M.Zajac, T.Ślęzak, J.Korecki "Structure, Composition and Crystallinity of Epitaxial Magnetite Thin Films", Surf. Sci., 602 (2008) 2358-2362
41. A.Knapik, A.Drelinkiewicz, M.Szaleniec, W.Makowski, A.Waksmundzka-Góra, A.Bukowska, W.Bukowski, J.Noworól "Hydrogenation of Unsaturated Carboxylic Acids on Functional Gel-Type Resin Supported Pd Catalysts. The Effect of Reactant Structure", J. Mol. Catal. A, 279 (2008) 47-56
42. A.Knapik, A.Drelinkiewicz, A.Waksmundzka-Góra, A.Bukowska, W.Bukowski, J.Noworól "Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol in the Presence of Functional Crosslinked Resin Supported Pd Catalysts. The role of Polymer Properties in Activity/Selectivity Pattern", Catal. Lett., 122 (2008) 155-166
43. J.Kochana, P.Nowak, A.Jarosz-Wilkołazka, M.Bieroń "Tyrosinase/Laccase Bienenzyme Biosensor for Amperometric Determination of Phenolic Compounds", Microchem. J., 89 (2008) 171-174
44. M.Kolasińska, M.Zembala, M.Krasowska, P.Warszyński "Probing of Polyelectrolyte Monolayers by Zeta Potential and Wettability Measurements", J. Colloid Interface Sci., 326 (2008) 301-304
45. P.Kozyra, J.Załucka, M.Mitoraj, E.Broclawik, J.Datka "From Electron Density Flow Towards Activation: Benzene Interacting with Cu(I) and Ag(I) Sites in ZSM-5. DFT Modeling", Catal. Lett., 126 (2008) 241-246
46. M.Krasowska, J.Zawała, K.Małyśa "Air at Hydrophobic Surfaces and Kinetics of Three Phase Contact Formation", Adv. Colloid Interface. Sci., (2008) (available on-line)
47. K.Kwapień, E.Broclawik "Interaction of FeO⁺ Cation with Benzene, Aniline, and 3-Methylaniline: DFT Study of Oxygen Insertion Mechanism", Int. J. Quantum Chem., 108 (2008) 2016-2022

48. E.Lalik, J.Haber, A.J.Groszek "Oscillatory Rates of Heat Evolution During Sorption of Hydrogen in Palladium", *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008) 18483-18492
49. M.Łabanowska, E.Bidzinska, K.Dyrek, T.Fortuna, S.Pietrzyk, J.Roznowski, R.P.Socha "Cu²⁺ Ions as a Paramagnetic Probe in EPR Studium of Radicals Generated Thermally in Starch", *Starch/Stärke*, 60 (2008) 134-145
50. W.Łasocha, A.Rafalska-Łasocha, M.Grzywa, B.Gaweł "New Achievements in X-Ray Techniques in the Investigations of Catalysts", *Catal. Today*, 137 (2008) 504-509
51. K.Łątka, J.Gurgul, A.W.Pacyna, Y.Verbovytsky, R.Pöttgen "Mössbauer and Magnetic Characterization of TbRhSn", *Hyperfine Interactions*, 184 (2008) 39-43
52. K.Łątka, J.Gurgul, A.W.Pacyna, Y.Verbovytsky, J.Przewoźnik, R.Pöttgen "Bulk and Local Properties of DyRhSn", *J. Alloys Comp.*, (2008) (available on-line)
53. D.Majda, A.Korobov, U.Filek, B.Sulikowski, P.Midgley, D.Vowles, J.Klinowski "Low-Temperature Thermal Decomposition of Large Single Crystals of Ammonium Perchlorate", *Chem. Phys. Lett.*, 454 (2008) 233-236
54. K.Małyśa, K.Lunkenheimer, "Foams under Dynamic Conditions", *Current Opinion Colloid Interface Sci.*, 13 (2008) 150-162
55. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Desilication of ZSM-12 and MCM-22 Type Zeolites and Their Performance in Isomerization of α -Pinene", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 174 B (2008) 1231-1234
56. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski, Z.Olejniczak "Properties of Desilicated ZSM-5, ZSM-12, MCM-22 and ZSM-12/MCM-41 Derivatives in Isomerization of α -Pinene", *Catal. Lett.*, (2008) (available on-line)
57. K.Nawalany, B.Kozik, Sz.Zapotoczny, M.Kumorek, B.Jachimska, M.Kępczyński, M.Nowakowska "Properties of PEG Supported Tetraarylporphyrin in Aqueous Solution and Its Interaction with Liposomal Membranes", *J. Phys. Chem. B*, 112 (2008) 12231
58. K.Noga, P.P.Romańczyk, A.J.Włodarczyk, E.Broclawik "Theoretical Modeling of Electrochemical Interactions in Bimetallic Molybdenum Nitrosyl Complexes Incorporating Saturated Bridges", *Polyhedron*, 27 (2008) 2819-2824
59. M.Obradović, B.Babić, A.Kowal, V.Panić, S.Gojković "Electrochemical Properties of Mixed WC and Pt-Black Powders", *J. Serbian Chem. Soc.*, 73 (2008) 1197-1209
60. A.Pacuła, R.Mokaya "Synthesis and High Hydrogen Storage Capacity of Zeolite-Like Carbons Nanocast Using As-Synthesized Zeolite Templates", *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008) 2764-2769
61. T.Pańczyk, T.P.Warzocho, W.Rudziński "Studies of the Collision Frequency of Ideal Gas Particles with the Surfaces of the Objects Created Using the Ballistic Deposition Technique", *Appl. Surf. Sci.*, 254 (2008) 2285-2291

62. T.Pańczyk, T.P.Warzocha, P.Szabelski, W.Rudziński "Kinetic Adsorption Energy Distributions of Rough Surfaces: a Computational Study", *Langmuir*, 24 (2008) 8719-8725
63. E.Partyka-Jankowska, B.Sepioł, M.Sladecek, D.Kmieć, J.Korecki, T.Ślęzak, M.Zajac, S.Stankov, R.Rüffer, G.Vogl "Nuclear Resonant Scattering Studies of Electric Field Gradient in Fe Monolayer on W(110)", *Surf. Sci.*, 602 (2008) 1453-1457
64. V.Pashkova, K.Góra-Marek, P.Sarv, M.Derewiński "Formation and Nature of Active Sites in the FAU- and BEA-Composites", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 174B (2008) 845
65. V.Pashkova, W.Pudło, A.Jarzębski, M.Derewiński "Composite Materials Containing Zeolitic Layers Deposited on the Silica/alumina Porous Monoliths", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 174A (2008) 381-384
66. V.Pashkova, E.Włoch, A.Mikołajczyk, M.Łaniecki, B.Sulikowski, M.Derewiński "Composite SBA-15/MFI Type Materials: Preparation, Characterization and Catalytic Performance", *Catal. Lett.*, (2008) (available on-line)
67. A.M.Puziy, O.I.Poddubnaya, R.P.Socha, J.Gurgul, M.Wiśniewski "XPS and NMR Studies of Phosphoric Acid Activated Carbons", *Carbon*, 46 (2008) 2113-2123
68. M.Rams, R.Kmieć, M.Kruzel, Ż.Świątkowska, J.Gurgul, K.Królas, K.Tomala "⁹⁹Ru Perturbed Angular Correlation and Mössbauer Effect Investigations of SrRuO₃ and CaRuO₃", *J. Alloys Comp.*, (2008) (available on-line)
69. P.Rejmak, E.Broclawik, M.Radoń, K.Góra-Marek, J.Datka "Nitrogen Monoxide Interaction with Cu(I) Sites in X and Y Zeolites: Quantum Chemical Calculations and IR Studies", *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008) 17998–18010
70. A.Rinaldi, J.Zhang, J.Mizera, F.Girgsdies, N.Wang, S.Bee Abd Hamid, R.Schlögl, D.Sheng Su "Facile Synthesis of Carbon Nanotube/Natural Bentonite Composites as a Stable Catalyst for Styrene Synthesis", *Chem. Commun.*, 48 (2008) 6528-6530
71. K.Rosół, K.Szczubiałka, B.Jachimaska, Sz.Zapotoczny, M.Nowakowska, "Interaction of a Smart Cationic Polyelectrolyte Based on a Hydroxypropylcellulose with an Anionic Surfactant", *J. Appl. Polymer Sc.*, 105 (2008) 3184-3189
72. W.Rudziński, W.Płaziński "On the Theoretical Development and the Applicability of the Lagergren Equation for the Kinetics of Adsorption at the Solid/Solution Interfaces", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 329-338
73. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Dyes Adsorption at the Solid/Solution Interfaces: A Theoretical Description Based on the Two-Step Kinetic Model", *Environ.Sci. Technol.*, 42 (2008) 2470-2475
74. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Solute Adsorption at the Solid/Aqueous Interfaces: Searching for the Theoretical Background of the Modified Pseudo-First Order Kinetic Equation", *Langmuir*, 24 (2008) 5393-5399

75. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Solute Adsorption at Solid/Solution Interfaces: On the Special Features of the Initial Adsorption Kinetics", *Langmuir*, 24 (2008) 6738-6744
76. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Charged Species Adsorption at Heterogeneous Solid/Solution Interfaces: a Theoretical Treatment Based on Statistical Rate Theory", *J. Colloid Interface Sci.*, 327 (2008) 36-43
77. M.Ruszczak, M.Strojecki, M.Łukomski, J.Koperski "Potential Energy Curves for the B11u State and Short-Range Part of the X10+g State of Cd₂ Determined from Excitation and Dispersed Fluorescence Spectra Recorded Using the B11u←X10g+ Transition", *J. Phys. B*, 41 (2008) 245101
78. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, G.Stochel "Ligand Binding Properties of Cobalamins", *Theor. Chem. Acc.*, 120 (2008) 411-419
79. A.R.Shaikh, R.Sahnoun, E.Broclawik, M.Koyama, H.Tsuboi, N.Hatakeyama, A.Endou, H.Tabaka, M.Kubo, C.A.del Carpio, A.Miyamoto "Quantum Chemical Studies for Oxidation of Morpholine by Cytochrome P450", *J. Inorg. Biochem.*, (2008) (available on-line)
80. D.Tripković, S.Stefanović, A.Tripković, A.Kowal, V.Jovanović "Structural Effect in Electrocatalysis: Formic Acid Oxidation on Pt Electrodeposited on Glassy Carbon Support", *J. Electrochem. Soc.*, 155 (2008) B281-B289
81. K.Terpiłowski, M.Krasowska, E.Chibowski, K.Małyśa "Influence of Teflon Surface Roughness on the Contact Angle and the Bubble Attachment in Water", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 11-16
82. S.Stankov, R.Rueffer, M.Sladecek, M.Rennhofer, B.Sepioł, G.Vogl, N.Spiridis, T.Ślęzak, J.Korecki "An Ultra-High Vacuum System for *in-situ* Studies of Thin Films and Nanostructures by Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", *Rev. Sci. Instruments*, 79 (2008) 045108
83. S.Stefanović, D.Tripković, A.Kowal, D.Minić, V.Jovanović, A.Tripković "Influence of Surface Morphology on Methanol Oxidation at Glassy Carbon Supported Pt Catalyst", *J. Serbian Chem. Soc.*, 73 (2008) 845-859
84. A.Stupakiewicz, A.Maziewski, K.Matlak, N.Spiridis, M.Ślęzak, T.Ślęzak, M.Zajac, J.Korecki "Tailoring of the Perpendicular Magnetization Component in Ferromagnetic Films on a Vicinal Substrate", *Phys. Rev. Lett.*, 101 (2008) 217202
85. A.Stupakiewicz, A.Maziewski, M.Ślęzak, T.Ślęzak, M.Zajac, K.Matlak, J.Korecki "Magnetization Processes in Ultrathin Au/Co/Au Films Grown on bi-Facial Mo(110)/Mo(540) Single Crystal", *J. Appl. Phys.*, 103 (2008) 07B520
86. P.Szabelski, T.Pańczyk, M.Drach "Monte Carlo Modeling of Chiral Adsorption on Nanostructured Chiral Surfaces and Slit Pores", *Langmuir*, 24 (2008) 12972-12980
87. M.Szaleniec, R.Tadeusiewicz, M.Witko "The Selection of Optimal Neural Models for Forecasting of Biological Activity of Chemical Compounds", *Neurocomputing*, 72 (2008) 241-256

88. M.Szaleniec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Modification of Tetraphenylporphyrine Ring in Manganese (III) Complexes - Theoretical Description of the Influence on Their Physicochemical Properties", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1853-1863
89. M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider "Quantum Chemical Modelling of the C–H Cleavage Mechanism in Oxidation of Ethylbenzene and Its Derivates by Ethylbenzene Dehydrogenase", *J. Mol. Catal. A*, 286 (2008) 128–136
90. W.Tejschman, K.Zborowski W.Łasocha, L.M.Proniewicz "Selenomaltol - Synthesis, Spectroscopy and Theoretical Calculations", *Heterocycles*, 75 (2008) 1931-1942
91. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Electronic Properties of the Active Sites Present at the (011) Surface of MoO₂", *Adsorption Sci. Technol.*, 25 (2007) 583-596 (printed in 2008)
92. E.Wenda, A.Bielański "The Phase Diagram of V₂O₅-MoO₃-Ag₂O System. Part III. Vanadium-Rich Part of the Diagram", *J. Thermal Anal. Calorimetry*, 92 (2008) 921-929
93. E.Wenda, A.Bielański "The Phase Diagram of V₂O₅-MoO₃-Ag₂O System. Part IV. Molybdenum-Rich Part of the Diagram", *J. Thermal Anal. Calorimetry*, 92 (2008) 931-937
94. E.Wenda, A.Bielański "The Phase Diagram of V₂O₅-MoO₃-Ag₂O System. Part V. Phase Diagram of the Ternary System", *J. Thermal Anal. Calorimetry*, 93 (2008) 973-976
95. E.Wenda, A.Bielański "Ternary System V₂O₅-MoO₃-Ag₂O Diagram, *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1705-1709
96. P.Weroński, M.Elimelech "Novel Numerical Method for Calculating Initial Flux of Colloid Particle Adsorption Through an Energy Barrier", *J. Colloid Interface Sci.*, 319 (2008) 406-415
97. P.Weroński, Y.Jiang, S.Rasmussen "Application of Molecular Dynamics Computer Simulations in the Design of a Minimal Self-Replicating Molecular Machine", *Complexity*, 13 (2008) 10-17
98. J.Węgrzyńska, G.Para, J.Chlebicki, P.Warszyński, K.A.Wilk "The Adsorption of Multiple Ammonium Salts at the Air Solution Interface", *Langmuir*, 24 (2008) 3171-3180
99. W.Witko, R.Tokarz-Sobieraj "Quantum Modeling of Geometric and Electronic Structures of some Mesogenic Systems", *Mol. Crystals Liquid Crystals*, 480 (2008) 219-228
100. J.Załucka, P.Kozyra, M.Mitoraj, E.Broclawik, J.Datka "Cu⁺, Ag⁺ and Na⁺ Cationic Sites in ZSM-5 Interacting with Benzene: DFT Modeling", *Polish J. Chem.*, 82 (2008) 1801-1808
101. J.Zawała, J.Drzymała, K.Małyś "An Investigations into the Mechanism of the Three-Phase Contact Formation at Fluorite Surface by the Colliding Bubble", *Int. J. Miner. Process.*, 88 (2008) 72-79

ARTYKUŁY W CZASOPISMACH I KSIĄŻKACH O OGRANICZONEJ CYRKULACJI I ARTYKUŁY POPULARNO-NAUKOWE

1. Z.Adamczyk, K.Jaszczółt, B.Jachimska "Określenie właściwości fizykochemicznych i stabilności termicznej hydroksyapatytu", *Prace Instytutu Odlewnictwa*, 48 (2008) 21-29
2. Z.Adamczyk, K.Jaszczółt, A.Karwiński, B.Jachimska "Physicochemical Characteristics of Binders and Liquid Slurries Used for Investment Casting of Reactive Metals", in: "Physical and Chemical Processes in Metal Casting" (A.Baliński, Ed.), Foundry Research Institute, Kraków 2008, pp 9-20 [ISBN 978-83-88770-32-6]
3. T.Fickenscher, S.Rayaprol, J.von Appen, R.Dronskowski, R.Poettgen, K.Łątka, J.Gurgul "Crystal Structure, Chemical Bonding and Magnetic Hyperfine Interactions in GdRu₂SiC", *ChemInform*, 39 (2008)
4. M.Gabrovska, D.Mucha, P.Tzvetkov, J.Krstić, R.Edreva-Kardjieva, D.Jovanović, M.Zimowska "*In situ* XRD Study of Reduced NiMg/SiO₂ Catalyst Precursors for Vegetable Oil hydrogenation Modified by Pd or Ag", in: "Nanoscience and Nanotechnology", Academic Publishing House, Sofia 2008, p.216-219
5. A.Kowal "Rozwój nowoczesnych ogniw paliwowych", in: "Innowacyjne i przyjazne dla środowiska systemy przerobcze surowców mineralnych" (A.Klich, A.Mader, Eds.), KOMAG, Gliwice 2008, p.161-170 [ISDN 978-83-60708-18-7]
6. P.Nowak, A.Gucwa "Influence of Surfactant Adsorption on the Leaching of Copper Sulfides", *Acta Metallurgica Slovaca*, 14 (2008) 196-203 (ISSN-1335-1532)
7. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Multi-Site-Occupancy Adsorption at the Solid/Solution Interfaces. The Absolute Rate Theory Approach", *Annales Universitatis Mariae Curie-Skłodowska, Sectio AA: Chemia*, 2007, LXIII. (2008) 130-143
8. A.Michalik-Zym, M.Zimowska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Layered Sodium Disilicates as Precursors of Mesoporous Silicas. Part I: Optimisation of the Synthesis Procedure of δ -Na₂Si₂O₅ and α -Na₂Si₂O₅", *Mineralogia Polonica*, 38 (2007) 151-160 (published in 2008)
9. A.Michalik-Zym, M.Zimowska, E.Bielańska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Layered Sodium Disilicates as Precursors of Mesoporous Silicas. Part II: Hydration of δ -Na₂Si₂O₅ and α -Na₂Si₂O₅", *Mineralogia Polonica*, 38 (2007) 161-170 (published in 2008)

ARYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. K.Banaś, V.Pashkova, A.Węgrzynowicz, M.Derewiński "Highly Porous Multimodal Materials Assembled from Protozeolitic Building Units of MFI Type", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.97-102 [ISBN 978-83-60514-07-8]
2. K.Banaś, V.Pashkova, A.Węgrzynowicz, M.Derewiński "New Highly Porous Catalytic System Prepared by Assembling Protozeolitic Building Units of the MFI Structure", *Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis* (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p.209-214 [ISBN 978-80-227-2923-9]

3. C.J.Bergsten, M.Odlyha, S.Jakieła, J.M.Slater, A.Cavicchioli, D.L.A.de Faria, A.Niklasson, J.E.Svensson, Ł.Bratasz, D.Camuffo, A.della Valle, F.Baldini, R.Falciai, A.A.Mencaglia, F.Senesi "Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organs (SENSORGAN)", in: Preprints 8th EC Commission Conf. on Research for Protection, Conservation and Enhancement of Cultural Heritage "Cultural Heritage Research Meets Practice", (J.Kolar, M.Strlič, Eds.), National and University Library, Ljubljana 2008, p.17-18
4. Ł.Bratasz, S.Jakieła, Ł.Lasyk, R.Kozłowski "Direct Monitoring of Damage in Clay-Containing Sandstones by Acoustic Emission", Proc. 11th Int. Congr. on Deterioration and Conservation of Stone (J.W.Łukaszewicz, P.Niemcewicz), Eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Mikołaja Kopernika, Toruń 2008, p.349-356
5. Ł.Bratasz, R.Kozłowski, A.Kozłowska, S.Rivers "Conservation of the Mazarin Chest: Structural Response of Japanese Lacquer to Variations in Relative Humidity", Preprints. ICOM Committee for Conservation, 15th Triennial Conf. (I.Verger, Ed.), New Delhi 2008, p.933-940
6. E.Brocławik, P.Rejmak, P.Kozyra, J.Zalucka, M.Mitoraj "Theoretical Modeling of Smart Catalytic Activity of Copper Centers in Zeolites: from Electron Density Flow towards Activation", Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p.41-46 [ISBN 978-80-227-2923-9]
7. U.Filek, B.Sulikowski "Epoxidation of Norbornene over Supported H₄PVMo₁₁O₄₀ Catalysts", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.253-257 [ISBN 978-83-60514-07-8]
8. U.Filek, B.Sulikowski, A.Bressel, M.Hunger "H₃PW₁₂O₄₀, H₃PMo₁₂O₄₀, H₄PV₁Mo₁₁O₄₀ and Their Aluminium, Gallium and Indium Salts as Catalysts for Liquid Phase Oxidation of Norbornene", Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p.131-137 [ISBN 978-80-227-2923-9]
9. Ch.U.Grosse, G.Pascale, S.Simon, M.Krüger, A.Troi, C.Colla, V.Rajčić, M.Łukomski "Recent Advances in Smart Monitoring of Historic Structures", Preprints 8th EC Commission Conf. on Research for Protection, Conservation and Enhancement of Cultural Heritage "Cultural Heritage Research Meets Practice", (J.Kolar, M.Strlič, Eds.), National and University Library, Ljubljana 2008, p.20-21
10. Ch.U.Grosse, G.Pascale, S.Simon, M.Krüger, A.Troi, C.Colla, V.Rajčić, M.Łukomski "Smart Monitoring of Historic Structures - Overview about a Medium-Scale Research Project in the EU 7th Research Framework Programme", Proc. Int. Workshop SMW08 "In situ Monitoring of Monumental Surfaces" (P.Tiano, C.Pardini, Eds.), Edifir Edizioni, Firenze 2008, p.379-384
11. A.Klisińska-Kopacz, R.Tišlova, G.Adamski, R.Kozłowski "Control of Porosity Structure to Produce Roman Cement Mortars Compatible with the Historic Substrate", Proc. 11th Int. Congr. on Deterioration and Conservation of Stone (J.W.Łukaszewicz, P.Niemcewicz), Eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Mikołaja Kopernika, Toruń 2008, p.931-938

12. M.Kopczyk, A.Kowal, A.Sierczyńska, K.Lota, G. Lota "Hydrogen Storage Alloys as Anode Materials for the Alkaline Fuel Cell", Proc. Int. Conf. "Advanced Batteries and Accumulators" (J.Vondrak, M.Sedlarikova, Eds.), Brno University of Technology, Brno 2008, p.97-100
13. A.Kowal, M.Kopczyk, A.Cuesta, C.Gutierrez, J.Marco "Preparation of Highly Doped Tin Dioxide Polycrystalline Layers and Characterization by Use of EERS, XPS and AFM", Proc. 20th Congr. of Chemists and Technologists of Macedonia (S.Jordanov, Ed.), SC&TM, Ohrid 2008, p.218-221 [ISBN 978-9989-760-06-8]
14. A.Kowal, K.Wieczorek-Ciurowa, M.Pavlović, Č.Lačnjevac, M.Gligorić "Modified SnO₂ Anodes Used for Oxidative Treatment of Organic Pollutants", Proc. Int. Conf. "Water Supply and Sewerage '08" (N.Petrović, Ed.) SIITS, Belgrade 2008, p.87-97 [ISBN 978-86-80067-21-6]
15. P.Kozyra, J.Zalucka, M.Mitoraj, E.Broclawik, J.Datks "Interaction of Cu⁺ and Ag⁺ Sites in ZSM-5 with Benzene: Application of NOCV", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.163-168 [ISBN 978-83-60514-07-8]
16. I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon, K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Catalytic Membrane Reactors for the Removal of Organic Matter in Water", Book of Abstracts. 10th Int. Conf. on Inorganic Membranes (ICIM), Tokyo 2008
17. Ł.Lasyk, M.Łukomski, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Vibration as a Hazard During the Transportation of Canvas Paintings", in: "Conservation and Access: Contributions to the London Congress 2008" (D.Saunders, J.H.Townsend, S.Woodcock, Eds.), The International Institute of Conservation of Historic and Artistic Works, London 2008, p.64-68
18. K.Małyś, J.Zawała, "On the Dynamics of Liquid Film Formation and Rupture at Various Interfaces by the Colliding Bubble", in: "Nanoscale Phenomena and Structures" (D.Kashchiev, Ed.), Prof. Marin Drinov Academic Publishing House, Sofia 2008, p.135-142
19. A.Micek-Ilnicka "The Role of Water in Catalytic ETBE Synthesis on Heteropolyacids", Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p.138-143 [ISBN 978-80-227-2923-9]
20. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Desilication and/or Hydrothermal Conditions for ZSM-12 Modification and a ZSM-12/MCM-41 Composite Synthesis: Catalytic Activity in Isomerization of α -Pinene", Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p. 344-349 [ISBN 978-80-227-2923-9]
21. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski, Z.Olejniczak "Isomerization of α -Pinene over Desilicated ZSM-5, ZSM-12 and MCM-22 Zeolites", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.245-252 [ISBN 978-83-60514-07-8]

22. M.Odlyha, S.Jakiela, J.M.Slater, R.Campana, C. Theodorakopoulos, C.J.Bergsten, A.Cavicchioli, D.L.A.de Faria, A.Niklasson, J.E.Svensson, T.Gronfort, E.Dahlin, M.Scharff "The Monitoring of Indoor Museum Environments and the Impact of their Corrosivity on Complex Organic Materials", in: Preprints 8th EC Commission Conf. on Research for Protection, Conservation and Enhancement of Cultural Heritage "Cultural Heritage Research Meets Practice", (J.Kolar, M.Strlič, Eds.), National and University Library, Ljubljana 2008, p.53-54
23. V.Pashkova, E.Włoch, E.Bielańska, M.Derewiński "Preparation of Composite Materials Containing a Zeolite Phase Dispersed in the Porous Silica Monoliths", Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p.203-208 [ISBN 978-80-227-2923-9]
24. V.Pashkova, E.Włoch, B.Sulikowski, M.Derewiński "Composite Systems Containig MFI Nanodomains Based on SBA-15 Mesoporous Material", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.103-108 [ISBN 978-83-60514-07-8]
25. B.Sulikowski, Z.Żurek, A.Łukaszczyk, M.Lekka "Ferrierite Type Zeolite Coatings on Metallic Substrates", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.115-120 [ISBN 978-83-60514-07-8]
26. M.Szaleniec "Modelowanie złożoności w chemii metodami statystycznymi z wykorzystaniem pakietu STATISTICA", Mater. Konf. Technologie Informacyjne dla Chemików (I.Maciejowska et al., Eds.), Wydział Chemii UJ, Kraków 2008, p.19-26 [ISBN 978-83-921505-4-1]
27. R.Todorov, J.Zawała, K.Małyś, D.Exerowa "Influence of pH and BSA Solutions on Bubble Motion and Stability of the Foam Films Formed", in: "Nanoscale Phenomena and Structures" (D.Kashchiev, Ed.), Prof. Marin Drinov Academic Publishing House, Sofia 2008, p.159-162
28. J.Załuca, P.Kozyra, E.Broclawik, M.Mitoraj, J.Datka "Interaction of Organic Molecules (Benzene, Acetylene, Formaldehyde) with Cu⁺, Ag⁺ and Na⁺ Sites in ZSM-5 – DFT Calculations", in: "Proceedings of 15th Zeolite Forum" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.175-180 [ISBN 978-83-60514-07-8]

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Nattich "Mechanisms of Nanoparticle and Protein Deposition at Heterogeneous and Patterned Surfaces", Proc. US-Poland Workshop on Interfacial Phenomena and Advanced Materials, Gdańsk 2008 [ISBN 978-83-908112-4-6]
2. Z.Adamczyk, A.Brątek, A.Michna, M.Nattich "Streaming Potential Characterization of Particle and Polyelectrolyte Adsorption Layers at Mica", Proc. Workshop of Cost Action D43 "Functionalized Materials and Interfaces", Berlin 2008

3. Z.Adamczyk, A.Brateg, E.Szelag, A.Bastrzyk, J.Barbasz "Colloid Particle Deposition on Heterogeneous Surfaces Produced by Mono- and Bilayers of Polyelectrolytes", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.561 [ISBN 978-83-60514-08-5]
4. Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki, A.Michna, M.Nattich "Mono- and Bilayers of Macroions on Mica Studied by the Streaming Potential Method", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.219 [ISBN 978-83-60514-08-5]
5. Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki, M.Nattich, J.Barbasz "Characterization of Polyelectrolyte Mono- and Bilayers on Mica by the Streaming Potential and Particle Deposition Methods", Proc. Meeting of Polymer Network Group – Polymer Networks: Chemistry, Physics, Biology and Applications – PNG2008, Larnaca 2008
6. Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki, M.Nattich, J.Barbasz, B.Jachimska "Characterization of Polyelectrolyte Mono- and Multilayers on Mica by the Streaming Potential and Particle Deposition Methods", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.560 [ISBN 978-83-60514-08-5]
7. Z.Adamczyk, M.Nattich, A.Brateg-Skicki, P.Warszyński "Structure of poly (Acrylic) Acid in Electrolyte Solutions and on Surfaces Determined from Simulations and Viscosity Measurements", The Polymer Processing Society 24th Annual Meeting, Salerno 2008
8. Z.Adamczyk, M.Nattich, J.Barbasz "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous Surfaces", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPCHEM, Opole 2008, p.77
9. Z.Adamczyk, M.Nattich, J.Barbasz "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous and Patterned Surfaces", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.312 [ISBN 978-83-60514-08-5]
10. Z.Adamczyk, M.Wasilewska, B.Jachimska "Protein Stability in Electrolyte Solutions", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.239 [ISBN 978-83-60514-08-5]
11. K.Alexopoulos, P.Hejduk, M.Witko "Theoretical study of the Effect of (001) TiO₂ Anatase Support on V₂O₅", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.61 [ISBN 978-83-60514-08-5]
12. J.Barbasz, Z.Adamczyk, M.Nattich "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous and Patterned Surfaces", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.569 [ISBN 978-83-60514-08-5]

13. J.Barbasz, M.Cieśla "Molecular Dynamics Simulation of Polyelectrolytes (Advanced Model of Lennar-Jones Polymers)", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.570 [ISBN 978-83-60514-08-5]
14. M.Bazarnik, M.Zimowska, K.Bahranowski, E.Serwicka "Synthetic Kanemite as a Base of Mesoporous Catalysts of FSM type", Extended Abstracts. 9th Int. Geological Conf. Ph.D. Students and Young Scientists, Zawoja-Herlany 2008, p.13 [ISBN 978-83-60958-10-0]
15. L.Benco, T.Bucko, R.Gryboś, J.Hafner "Decomposition of N₂O over Fe-fer. A DFT Study", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.62 [ISBN 978-83-60514-08-5]
16. A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk, P.Warszyński, M.Nattich "Polyelectrolyte Structures Determined from Simulations, PCS and Viscosity Measurement", Book of Abstracts. 7th Int. Symp. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008, p.144
17. T.Borowski, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "Reaction Mechanism of Apocarotenoid Oxygenase (ACO). A DFT Study", in: "Catalysis for Society. Conference Proceedings"(B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.65 [ISBN 978-83-60514-08-5]
18. E.Broclawik, T.Borowski, M.Radoń "Smart Catalysis on Enzymes with Iron-oxo Core: Theory Behind Electronic Structure", Book of Abstracts. 8th Congr. of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2008, Sydney 2008, OC014
19. E.Broclawik, T.Borowski, M.Radoń "Theoretical Description of Smart Catalysis on Active Sites with Iron-oxo Core", Book of Abstracts. 6th Congr. of the Int. Society for Theoretical Chemical Physics, Vancouver 2008, p.222
20. A.Burkat-Dulak, M.Derewiński "New Support for Deposition of Highly Dispersed Metal Clusters Based on MFI Zeolite Crystals with Meso-/Macropores", Proc. 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis (B.Horváth, M.Pronec, Eds.), Slovak University of Technology, Bratislava 2008, p.129-130 [ISBN 978-80-227-2923-9]
21. A.Burkat-Dulak, L.Lityńska-Dobrzyńska, M.Derewiński "Preparation of New Zeolite Supports for Bifunctional (Acid/Redox) Catalysts", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.250 [ISBN 978-83-60514-08-5]
22. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, W.Stanuch, J.Sobczak, A.Bukowska, W.Bukowski "Żywica metakrylanowo-styrenowa modyfikowana etylenodiaminą jako nośnik dla nanocząstek palladu", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.166
23. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, A.Waksmundzka-Góra, W.Stanuch, J.Noworól, A.Bukowska, W.Bukowski, A.Zięba "Selective Hydrogenation of Alkyne to Alkene over Functional Cellulose Type Resin-Pd Catalysts", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.117 [ISBN 978-83-60514-08-5]

24. D.Dronka-Góra, G.Para, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Formation of Interfacial Surfactant-Polyelectrolyte Complexes at Liquid/Liquid Interfaces", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.82
25. D.Dronka-Góra, K.Szczepanowicz, G.Para, P.Warszyński "Surface Activity of Solutions of Selected Silica Sources"; Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, p.59
26. D.Dronka-Góra, K.Szczepanowicz, G.Para, P.Warszyński "Surface Activity of Solutions of Selected Silica Sources", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, P59
27. A.Dudzik, M.Pawul, M.Szaleniec, M.Witko "Stereospecific Oxidation of Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Compounds by Ethylbenzene Dehydrogenase – Chiral Chromatographic Studies", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.236 [ISBN 978-83-60514-08-5]
28. R.Dula, M.Zimowska, J.Plona, B.Napruszewska, R.Janik, T.Machej, J.Gurgul, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-Like Cu-Mn-Al Compounds as Precursors of Mixed Oxide Catalysts for the Total Combustion of Toluene", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.118 [ISBN 978-83-60514-08-5]
29. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Waksmundzka, A.Drelinkiewicz, Z.Olejniczak "Immobilization of a Cationic Ruthenium(II) Complex in Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Its Application as Hydrogenation Catalyst", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, PI-PI-11-104 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
30. P.Dyshlovenko, P.Warszyński "Electrostatic Interactions of Colloid Particles at Charged Interface in 2D and 3D", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.228 [ISBN 978-83-60514-08-5]
31. S.Dźwigaj, J.Janas, J.Gurgul, R.P.Socha, T.Shishido, M.Che "Role of Mononuclear Cu(II) Species of CuSiBEA Zeolite in the Selective Catalytic Reduction of NO: Insight into the Reaction Mechanism", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.119 [ISBN 978-83-60514-08-5]
32. S.Dźwigaj, J.Janas, J.Mizera, J.Gurgul, R.P.Socha, T.Shishido, M.Che "Role of Monomolecular Cu(II) Species of CuSiBEA Zeolite in the SCR of NO by Ethanol", Proc. Annual Meeting of GDRI. Catalysis for Environment: Depollution, Renewable Energy and Clean Fuels, Zakopane 2008, p.23
33. M.Elżbieciak, M.Kolasińska, L.Szyk-Warszyńska, A.Trybała, J.Superata, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe - wielofunkcyjny materiał dla nanotechnologii", Książka Streszczeń. 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008, Sr 17:30A

34. M.Elżbieciak, S.Zapotoczny, P.Nowak, R.Krastev, M.Nowakowska, P.Warszyński "pH-Driven Non-Monotonic Growth of Polyelectrolyte Multilayers", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.444 [ISBN 978-83-60514-08-5]
35. M.Elżbieciak, M.Kolasińska, S.Zapotoczny, R.Krastev, P.Warszyński "Non-Monotonic Growth of Multilayers Formed by Weak Polyelectrolytes" Book of Abstracts. 7th Int. Symp. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008, p.103
36. U.Filek, A.Bressel, B.Sulikowski, M.Hunger "Structural Stability and Brønsted Activity of $H_3PW_{12}O_{40}$ and Its Aluminium Salt $AlPW_{12}O_{40}$ upon Heating", in: "Reports of The H.Niewodniczański Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Kraków 2008, abstract No. 10 (www.ifj.edu.pl/conf/mrj08/abstrakty.html)
37. M.Filek, E.Rudolphi-Skórska, M.Zembala "Wpływ kadmu i selenu na własności powierzchniowe błon plastydów pszenicy w warunkach *in vitro*", Materiały Konferencyjne. 8. Ogólnopolska Konf. "Kultury *in vitro* w fizjologii roślin", Kraków 2008, p.23
38. U.Filek, B.Sulikowski, A.Bressel, M.Hunger "Oxidation of Norbornene over Salts of Heteropolyacids", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.220 [ISBN 978-83-60514-08-5]
39. M.Gabrovska, D.Mucha, J.Krstić, R.Endreva-Kardijeva, D.Jvanović, M.Zimowska "Reduction of Ag-NiMg/SiO₂ Catalyst Precursors for Vegetable Oil Hydrogenation: *in situ* XRD Study", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.258 [ISBN 978-83-60514-08-5]
40. M.Gabrovska, D.Mucha, P.Tzvetkov, J.Krstić, R.Edreva-Kardjjeva, D.Jovanović, M.Zimowska "Study of Pd-NiMg/SiO₂ System by *in situ* X-Ray Diffraction Performed under Hydrogen", Book of Abstracts. 6th Int. Conf. of the Chemical Societies of the South-Eastern European Countries, Sofia 2008, p.262
41. B.Gaweł, W.Łasocha, A.Olech "New Indexing Procedure for Crystal Contact with Large Differences in Lattice Parameters Length", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.68 [ISBN 978-83-60514-08-5]
42. J.Goclon, R.Gryboś, M.Witko "Stability of the Low-Index V₂O₅ Surfaces. Periodic DFT Approach", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.69 [ISBN 978-83-60514-08-5]
43. J.Goclon, R.Gryboś, M.Witko "Oxygen Vacancy Formation on Low-Index V₂O₅ Surfaces. Periodic DFT Approach", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.70 [ISBN 978-83-60514-08-5]
44. J.Goclon, R.Gryboś, M.Witko "Reduce (010), (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Periodic DFT Studies", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P49 [ISBN 978-83-921060-5-0]

45. S.Gojković, A.Kowal, K.-S.Lee, Y.-E.Sung "Electrochemical Oxidation of Ethanol on Pt-Rh-SnO₂/XC-72 Nanocatalyst", Book of Abstracts. 59th Annual Meeting of ISE, (S.Thiery, Ed.), Sevilla 2008
46. H.J.Gotsis, M.Witko "Adsorption of Vanadium Atoms on Different Silica Surfaces: DFT Periodic Studies", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.71 [ISBN 978-83-60514-08-5]
47. R.Gryboś, J.Hafner, L.Benco "NO Adsorption on Palladium Clusters in Modrenite", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.72 [ISBN 978-83-60514-08-5]
48. R. Gryboś, J.Hafner, L.Benco "NO Adsorption on Palladium Clusters in Mordenite", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, p.481 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
49. R.Gryboś, J.Hafner, L.Benco "NO Adsorption on Palladium Clusters in Mordenite", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, p.481 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
50. R.Gryboś, T.Kasza, M.Witko "Catalysis in Space Exploration: Water Photodissociation Under Conditions Found on the Moon Surface", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, p.86 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
51. R.Gryboś, T.Kasza, M.Witko "Catalysis in Space Exploration: Water Photodissociation under Conditions Found on the Moon Surface", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, p.86 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
52. J.Gurgul, K.Łątka, A.W.Pacyna, C.P.Sebastian, R.Pöttgen "¹¹⁹Sn Mössbauer Spectroscopy of Intermetallic HoRhSn Compound", Program, Abstracts and List of Participants Book. Ogólnopolskie Seminarium Spektroskopii Mössbauerowskiej OSSM-2008, Koninki 2008
53. J.Haber "The Role of Catalysis in Determining Men's Quality of Life", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.11 [ISBN 978-83-60514-08-5]
54. J.Haber, M.Nattich, T.Machej "Alkali-Metal Promoted Rhodium-on-Alumina Catalysts for Nitrous Oxide Decomposition", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.128 [ISBN 978-83-60514-08-5]
55. P.Hejduk, M.Szaleniec, M.Witko "DFT Study on the Ammonia Activation at the Low-Indices V₂O₅ Surfaces in the SRC on NO_x", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.136
56. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption and Dissociation at Unsaturated (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Studies:", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.74 [ISBN 978-83-60514-08-5]
57. P.Hejduk, M.Witko "DFT Study on the Activation at the Low-Indices V₂O₅ Surfaces.in the SCR on NO_x", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.75 [ISBN 978-83-60514-08-5]

58. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption at Low-Indices (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Studies", Verhandlungen, 72nd Annual Meeting 2008 and DPG-Spring Meeting of the Condensed Matter Section, Berlin 2008, p.655 [ISSN 0420-0195]
59. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption at (010), (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Study", Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P47 [ISBN 978-83-921060-5-0]
60. P.Hejduk, M.Witko "Ammonia Activation at Low-Indices V₂O₅ Surfaces in the SCR of NO_x. DFT Cluster Study", Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P48 [ISBN 978-83-921060-5-0]
61. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption and Dissociation at Low-Indices (010), (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Studies", Book of Abstracts. 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, (G.P.Petrova et al., Eds.), Sofia 2008 [ISBN 978-954-323-396-0]
62. B.Jachimska, K.Onik, Z.Adamczyk "Behaviour of Hyperbranched Polyethylene Imine: Polyelectrolyte Structure to Design Surface for Control Protein Adsorption", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.629 [ISBN 978-83-60514-08-5]
63. B.Jachimska, K.Pamin, J.Połtowicz "Chitosan jako biodegradowalny nośnik makrocyklicznych kompleksów katalitycznych", 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008, Pt-P-16
64. B.Jachimska, K.Pamin, J.Połtowicz, K.Onik, R.Grabowski "Employment of Macrocyclic Metallocomplexes of Transition Metal Ions in Self-Assembling Systems for Catalytic Oxidation of Hydrocarbons", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.319 [ISBN 978-83-60514-08-5]
65. B.Jachimska, M.Wasilewska, Z. Adamczyk, „ Agregacja białek w roztworach wodnych”, 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008, Cz-10:20-B
66. T.Jasiński, W.Barzyk, K.Lunkenheimer, P.Warszyński "Surface Potential Isotherms of Nonionic Surfactants; Experiment v.s. Molecular Dynamic Simulations”, Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, 0163
67. T.Jasiński, B.Jachimska, Z.Adamczyk, P.Warszyński "Conformation of Polyelectrolytes in Solution; Molecular Dynamics Modelling v.s. Viscosity and Electrophoretic Mobility Measurements", Book of Abstracts. 7th Int. Symp.. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008, p.85
68. T.Jasiński, B.Jachimska, P.Warszyński, Z.Adamczyk "Conformations and Effective Charge of Low Molecular Weight Polyelectrolytes in Solution", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.303 [ISBN 978-83-60514-08-5]

69. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Oxidation of Cyclooctane in Presence of Transition Metal Substituted Lacunary Keggin Anions", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.137 [ISBN 978-83-60514-08-5]
70. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Utlenianie cyklooktanu w obecności soli organicznych modyfikowanych heteropolikwasów", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.160
71. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Utlenianie fenolu w fazie ciekłej w obecności tetraalkiloamonowych soli lakunarnych anionów Keggina", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.171
72. T.Kasza, A.Bielański "Reduced Silver Salt of Wells-Dawson Heteropolyacid as the Bi-Functional Catalyst", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.138 [ISBN 978-83-60514-08-5]
73. A.Klisińska-Kopacz, R.Grabowski, K.Samson, I.Gressel, B.Grzybowska-Świerkosz "Oxidative Dehydrogenation of Propane on VO_x/SiO₂ and VO_x/MgO Catalysts, Pure and with Potassium Additive: Catalysis and Kinetics", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.142 [ISBN 978-83-60514-08-5]
74. J.Korecki "Depth-Resolved Local Magnetization Structure Studied with Nuclear Spectroscopies", Programme and Abstracts Book. Workshop on High Temporal and Spatial Resolution Studies of Magnetic Nanostructures, Augustów 2008, p.25
75. A.Kowal "Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO₂ and Pt-Rh-SnO₂ Electrocatalysts for Ethanol Oxidation", Book of Abstracts. 2nd IDECAT Conf. on Catalysis, (R.van Santen, Ed.), University of Technology, Eindhoven 2008, p.67
76. A.Kowal, R.Adzic, K.-S.Lee, P.Olszewski, Y.-E.Sung "Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO₂ and Pt-Rh-SnO₂ Electrocatalysts for Ethanol Oxidation", Conf. Proc. 10th YUCORR (M.Pavlovic, Ed.), SISZAM, Belgrade 2008, p.16-19 [ISBN 978-86-82343-10-3]
77. A.Kowal, V.Jovanović, D.Tripković, A.Tripković, M.Mosiałek, G.Mordarski "Polished and Oxidized Glassy Carbon as a Support for Pt Electrodeposited Electrode for Oxidation of Formic Acid", Conf. Proc. CarboCat-III (D.Su, Ed.), Berlin 2008, p.107
78. A.Kowal, V.Komnenić, R.Zejnilović, K.Delijić "Synthesis of Au and Au-Pt Catalyst for Alcohol Oxidation", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.478 [ISBN 978-83-60514-08-5]
79. A.Kowal, U.Lačnjevac, E.Gębarowski, R.Koziół "AFM and SEM Studies of the Composite Polymers TopogRAPHY", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.479 [ISBN 978-83-60514-08-5]

80. A.Kowal, K.-S.Lee, S.-J.Yoo, P.Olszewski, Y.-E.Sung, R.Adzic "Synthesis and Properties of Oxide Modified Pt and Pt-Rh Alloy. Electrocatalysts for Ethanol Oxidation", Book of Abstracts. RSE-SEE 2008 (V.Horvat-Radosević, Ed.), Croatian Society of Chemical Engineers, Zagreb 2008, p.30-31 [ISBN 978-953-6894-33-8]
81. A.Kowal, M.Pavlović, M.Gruszczynski "AFM Studies of Corrosion Process of SnO₂ Anodes Used for Oxidative Treatment of Waste Waters", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.480 [ISBN 978-83-60514-08-5]
82. A.Kowal, J.Zhang, M.Shao, R.Adzic "New Catalyst for Electrochemical Oxidation of Ethanol: Pt/Rh/SnO₂", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.145 [ISBN 978-83-60514-08-5]
83. A.Król, A.Waksmundzka-Góra, Z.Zięba, J.W.Sobczak, A.Drelinkiewicz "Polyaniline and Poly(4-vinylpyridine) Supported Pd, Pt Catalysts. Role of Polymer in Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.148 [ISBN 978-83-60514-08-5]
84. M.Krzan, K.Małyśa "Influence of t Cationic Surfactants Adsorption on Local and Terminal Velocities of Bubbles", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, P18
85. W.Łasocha, M.Grzywa "Moybdates – Sythesis and Crystal Structure of New Catalytic Materials", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.272 [ISBN 978-83-60514-08-5]
86. K.Łątka, J.Gurgul, A.W.Pacyna, Y.Verbovytsky, J.Przewoźnik, R.Pöttgen "Bulk and Local Properties of DyRhSn", Proc. 16th Int. Conf. on Solid Compounds of Transition Elements, Dresden 2008
87. T.Machej, L.Matachowski, D.Mucha, J.Gurgul, R.P.Socha, Z.Olejniczak "Unique Structure of Ag₃PW₁₂O₄₀ Salt – the Influence of Temperature and Hydrogen Treatment", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.273 [ISBN 978-83-60514-08-5]
88. K.Małyśa, "Adsorption at the Interface of the Rising Bubbles as a Method for Detecting of Organic Contaminants in Water", Abstracts. Conf. CITEDD '2008, Tlemcen 2008, p.12
89. J.Matusik, A.Gaweł, E.Bielańska "Aluminosilicate Nanotubes Derived from Kaolinite Group Minerals", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.110 [ISSN 1896-2203]
90. A.Micek-Ilnicka "Solid Heteropolyacids as Supramolecular Catalysts. Case Study: Tertiary Ethers Synthesis", Book of Abstract. Conf. on Supramolecular Approaches to Catalysis, Barcelona 2008, p.79

91. A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Solid Heteropolyacids as Supramolecular Catalysts: Tertiary Ethers (MTBE, ETBE) Formation", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.168 [ISBN 978-83-60514-08-5]
92. A.Michalik-Zym, M.Zimowska, E.Bielańska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Layered Sodium Disilicates as Precursors of Mesoporous Silicas: Hydration of δ - $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ and α - $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ ", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.113 [ISSN 1896-2203]
93. Ł.Mokrzycki, Z.Olejniczak, B.Sulikowski "Desilication of ZSM-5, ZSM-12 and MCM-22 Type Zeolites and Their Performance in Isomerization of α -Pinene", in: "Reports of The H.Niewodniczański Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences, Kraków 2008, abstract No. 136 (www.ifj.edu.pl/conf/mrj08/abstrakty.html)
94. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Properties of Desilicated ZSM-5, Zsm12, MCM-22 Materials and Zeolite/McM-41 Derivatives in Isomerization of α -Pinene", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.172 [ISBN 978-83-60514-08-5]
95. A.Micek-Ilnicka, A.Lubańska "Hydrated and Dehydrated Well-Dawson and Keggin Type Heteropolyacids in ETBE Synthesis: a Comparative Study", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.276 [ISBN 978-83-60514-08-5]
96. A.Michalik-Zym, M.Zimowska, E.Bielańska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Layered Sodium Disilicates as Precursors of Mesoporous Silicas: Hydration of (δ - $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ and (σ - $\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ ", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.278 [ISBN 978-83-60514-08-5]
97. D.Nikolova, T.Grozeva, R.Edreva-Kadjieva, E.M.Serwicka "Promoted Sulfur-Resistant Re/ γ - Al_2O_3 Systems as Water-Gas Shift Reaction Catalysts: Synergism in Catalytic Performance", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, PI-44-65 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
98. K.Noga, P.P.Romańczyk, A.J.Włodarczyk, E.Broclawik "Theoretical Modeling of Electrochemical Interactions in Bimetallic Molybdenum Nitrosyl Complexes Incorporating Unsaturated Bridges", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.82 [ISBN 978-83-60514-08-5]
99. K.Noga, P.P.Romańczyk, A.J.Włodarczyk, E.Broclawik "DFT Modeling of Metal-Metal Electronic Interactions in Molybdenum Nitrosyl Complexes with Saturated Bridges", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P22 [ISBN 978-83-921060-5-0]
100. P.Nowak, P.Żurek, R.P.Socha, M.Ruszel, J.Haber "Preparation of TiO_2 for Photocatalytic Applications – Doping of TiO_2/Ti ith Transition Metal Ions", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.281 [ISBN 978-83-60514-08-5]

101. D.Nikolova, R.Edreva-Kardijeva, G.Tyuliev, H.Kolev, E.M.Serwicka, R.Dula, T.Grozeva "XPS and EPR Study of $(K_2O)(NiO)WO_3/\gamma-Al_2O_3$ System Catalysts for Water-Gas Shift Reaction with Sulfur Presence in the Feed", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.327 [ISBN 978-83-60514-08-5]
102. A.Pacuła, R.Mokaya, L.Kepiński "Characterization of Highly Porous Carbon Materials Prepared *via* Chemical Vapour Deposition (CVD) Method", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.285 [ISBN 978-83-60514-08-5]
103. A.Pacuła, R.Mokaya, B.Rajchel, L.Kepiński "Characterisation of Physicochemical Properties of N-Doped Carbon Materials Prepared *via* Chemical Vapour Deposition", Conf. Proc. CarboCat-III (D.Su, Ed.), Berlin 2008, p.69
104. A.Pacuła, P.Nowak, R.Mokaya, E.Bielańska "Application of Carbon Materials as Supports for Transition Metals in Electrocatalysis", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.284 [ISBN 978-83-60514-08-5]
105. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, R.Mokaya "Examination of Carbon Materials as Hydrogen Storage Media and as Support in Electrocatalysis", Conf. Proc. CarboCat-III (D.Su, Ed.), Berlin 2008, p.99
106. H.Pálková, J.Madejová, J.Podobiński, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka "Acid Sites Developed on Aluminated PCH Derived from Laponite", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.123 [ISSN 1896-2203]
107. H.Pálková, M.Zimowska, J.Madejová, E.M.Serwicka "Influence of the Amount of Cationic Surfactant and Its Counterion on Formation of Porous Clay Heterostructures", Proc. 8th Conf. on Solid State Chemistry, Bratislava 2008, P1-20
108. J.Plona, D.Mucha, B.Napruszewska, J.Podobiński, M.Śliwa, R.Grabowski, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-Derived Cu-Zn-Al-Zr Mixed Oxide Catalysts for CO₂ to Methanol Conversion", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.131 [ISSN 1896-2203]
109. K.Pamin, B.Jachimska, K.Onik, J.Połtowicz, R.Grabowski "Electrostatic Self-Assembly of Polyoxometalates on Chitosan as Catalysts of Oxidation of Cyclic Hydrocarbons", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.181 [ISBN 978-83-60514-08-5]
110. K.Pamin, J.Połtowicz "Aerobic Epoxidation of Propylene Catalyzed by Polyoxometalates", Book of Abstracts. 16th Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Firenze 2008, P 471
111. K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Keggin-Type Polyoxometalate Complexes as Catalysts of Propylene Epoxidation", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.228 [ISBN 978-83-60514-08-5]
112. T.Pańczyk, T.P.Warzocho, P.Szabelski, W.Rudziński "Kinetic Adsorption Energy Distributions of Geometrically Irregular Surfaces. A Molecular Dynamics Study", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.84 [ISBN 978-83-60514-08-5]

113. G.Para, J.Węgrzyńska, K.Wilk, P.Warszyński "Quantitative Description of Dimeric Cationic Surfactants Adsorption", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, P222
114. V.Pashkova, E.Włoch, A.Mikołajczak, M.Łaniecki, B.Sulikowski, M.Derewiński "Composite Materials Prepared by Partial Recrystallization of Amorphous Walls of Mesoporous Material SBA-15-Type into MFI-Type Mesoporous Domains", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.286 [ISBN 978-83-60514-08-5]
115. V.Pashkova, W.Pudło, A.Jarzębski, M.Derewiński "Composite Materials Containing Zeolite Layers Deposited on the Pre-Shaped Silica and Silica/Alumina Porous Monoliths", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.287 [ISBN 978-83-60514-08-5]
116. W.Piasecki "Modelling of the Relaxation Time of Proton Adsorption from Solution onto Metal Oxides: Classical and New Theoretical Approach", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.85 [ISBN 978-83-60514-08-5]
117. J.Plona, D.Mucha, B.Napruszewska, J.Podobiński, M.Śliwa, R.Grabowski, E.M.Serwicka "Layered Double Hydroxide-Derived Cu-Zn-Al-Zr-O Mixed Oxide Catalysts for CO₂ Utilization", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.289 [ISBN 978-83-60514-08-5]
118. W.Płaziński, W.Rudziński "Modelowanie wpływu pH na równowagę i kinetykę procesu biosorpcji jonów metali ciężkich", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.224
119. W.Płaziński, W.Rudziński "Biosorption in Environmental Protection". Proc. 6th Int. Symp. on Chromatography of Natural Products", Lublin 2008, p.32 [ISBN: 978-83-923841-2-0]
120. W.Płaziński, W.Rudziński, " Biosorption in Environmental Protection: Analysis of Experimental Data Using the Non-Competitive Adsorption Model", Proc. 6th Int. Symp. on Chromatography of Natural Products", Lublin 2008, p.171 [ISBN: 978-83-923841-2-0]
121. J.Połtowicz, E.Bielańska, E.M.Serwicka, R.Mokaya, Y.Xia "Aluminated SBA-15 as Supports for Mn(TMPyP) Porphyrin: the Role of Support Texture in Determining the Catalytic Performance in Cyclohexene Oxidation", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.328 [ISBN 978-83-60514-08-5]
122. J.Połtowicz, B.Jachimska, K.Pamin, K.Onik, R.Grabowski "Application of Self-Assembling System in Catalytic Oxidation", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.518 [ISBN 978-83-60514-08-5]
123. J.Połtowicz, K.Pamin, W.Bukowski, J.Noworól, J.Haber "Catalytic Activity of Schiff Base Complexes in Olefin Epoxidation", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.230 [ISBN 978-83-60514-08-5]

124. J.Połtowicz, K.Pamin, P.Staszewski, J.Haber, J.Noworól, W.Bukowski "Hydroxylation of Phenol by H₂O₂ – Influence of Salen Structure on Reaction Selectivity", Book of Abstracts. 16th Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Firenze 2008, P 455
125. J.Połtowicz, K.Pamin, E.Tabor, G.Pozzi, J.Haber "Fluorous Catalysis without Fluorous Solvent - Oxidation of Cyclooctane with Perfluorous Salen Metallocomplexes", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, p.48 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]
126. W.Pudło, V.Pashkova, M.Derewiński, A.B.Jarzębski "Silica-Alumina Composite Monoliths with a Hierarchical Pore Structure Containing the MFI-Type Zeolite Films", Proc. Nanotechnology Conf. and Trade Show NSTI Nanotech, Boston 2008
127. P.Rejmak, M.Radoń, E.Broclawik "Theoretical Studies on Dinitrosyl Species in Cu(I) Exchanged Zeolites", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.90 [ISBN 978-83-60514-08-5]
128. P.Rejmak, M.Radoń, E.Broclawik "Theoretical Studies on Dinitrosyl Species in Cu(I) Exchanged Zeolites", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P43 [ISBN 978-83-921060-5-0]
129. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Solute Adsorption at Solid/Solution Interfaces: a Theoretical Description Based on the Statistical Rate Theory", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.525 [ISBN 978-83-60514-08-5]
130. B.Sepioł, E.Partyka-Jankowska, M.Rennhofer, G.Vogl, J.Korecki, T.Ślęzak, M.Zajac, S.Stankov, R.Rüffer "Dynamic Studies with High-Resolution X-Ray Scattering Methods", Program, Abstracts and List of Participants Book. Ogólnopolskie Seminarium Spektroskopii Mössbauerowskiej OSSM-2008, Koninki 2008, p.14
131. A.Sierczyńska, M.Kopczyk, E.Bielańska, A.Kowal "Synthesis and Properties of Pt and Pt-Ru Nanocatalyst for Methanol Oxidation", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.531 [ISBN 978-83-60514-08-5]
132. R.P.Socha, N.Spiridis, E.Zackiewicz, J.Korecki "XPS and STM Studies of Gold Nanostructures on Iron-and-Oxygen-Rich Fe₃O₄(001) Surfaces", Program and Abstracts Book. 25th European Conf. on Surface Science ECOSS 25, Liverpool 2008, p.843
133. N.Spiridis, K.Freindl, W.Karaś, K.Matlak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Zajac, J. Korecki "Surface Electronic Properties of Fe(001) Probed via Hyperfine Interactions", Program and Abstracts Book. 25th European Conf. on Surface Science ECOSS 25, Liverpool 2008, p.778

134. M.Strycharczyk, H.Pálková, M.Zimowska, E.M.Serwicka, K.Bahranowski, Z.Olejniczak "Montmorillonite-Derived Porous Clay Heterostructures (PCHs): a Study of Structure Evolution", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.158 [ISSN 1896-2203]
135. J.Superata, I.Janowska, E.Bielańska, P.Warszyński "Hydrogen Peroxide Sensing Structures Built with Supra/Molecular Self-Assembly Techniques", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.538 [ISBN 978-83-60514-08-5]
136. J.Superata, I.Janowska, C.Pham-Huu, P.Warszyński "Carbon-Based Nanostructured Hybrid Composite Layers for Hydrogen Peroxide Chemical Sensing", Book of Abstract. European Materials Research Society E-MRS 2008 Spring Meeting, Strasbourg 2008, p.A1314
137. J.Superata, P.Warszyński "Miniaturization of Electrochemical Cells for Effective Testing of Hydrogen Peroxide Microsensor Electrodes", Abstract Book. 19th Int. Symp. on Pharmaceutical and Biomedical Analysis PBA 2008, Gdańsk 2008, p.222
138. J.Superata, P.Warszyński "Electrocatalytic Nanoparticle/Polyelectrolyte Hybrid Multilayers for Chemical Sensing", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.222 [ISBN 978-83-60514-08-5]
139. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "Quantum Chemical Modelling of Oxidation of Ethylbenzene by Ethylbenzene Dehydrogenase", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.93 [ISBN 978-83-60514-08-5]
140. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "Reaction Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase – Where Experiment Meets Theory", Book of Abstracts. 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, (G.P.Petrova et al., Eds.), Sofia 2008, p.24 [ISBN 978-954-323-396-0]
141. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Pawul, B.Kozik, M.Witko "Ethylbenzene Dehydrogenase – Stereoselective Oxidation of Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Compounds. Theory and Experiment", Księga Streszczeń. 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008, p.221
142. M.Szaleniec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Porphyrin-Based Catalysts – Structure Property Relationship", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.94 [ISBN 978-83-60514-08-5]
143. M.Szaleniec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Porphyrin-based Catalysts – Quantum Chemical Study", Book of Abstracts. 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, (G.P.Petrova et al., Eds.), Sofia 2008, p.74 [ISBN 978-954-323-396-0]
144. M.Szaleniec, M.Witko "Biotransformacje węglowodorów alkiloaromatycznych do chiralnych alkoholi drugorzędowych z zastosowaniem dehydrogenazy" Mater. Konf. BUPF 2008 Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym, kosmetycznym i spożywczym, Warszawa 2008

145. K.Szczepanowicz, D.Dronka-Góra, G.Para, A.M.Bouzga, C.Simon, P.Warszyński "Chloroform Emulsions Containing TEOS, APS and DTSACL as Cores for Microencapsulation", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.395 [ISBN 978-83-60514-08-5]
146. K.Szczepanowicz, D.Dronka-Góra, G.Para, P.Warszyński "Encapsulation of Liquid Cores by Layer-by-Layer Adsorption of Polyelectrolytes", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.395 [ISBN 978-83-60514-08-5]
147. K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon "Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment – Preparations and Testing of the Photocatalyst", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.323 [ISBN 978-83-60514-08-5]
148. K.Szczepanowicz, D.Wodka, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon "Preparation of TiO₂/Silver Nano-Particles Composites for Photo-Catalytic Applications in the Removal of Organic Matter from Water", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.324 [ISBN 978-83-60514-08-5]
149. L.Szyk-Warszyńska, C.Gergely, E.Jarek "Calcium Uptake by Casein Embedded in Polyelectrolyte Multilayer", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IKiFP PAN. Kraków 2008, p.137 [ISBN 978-83-60514-08-5]
150. L.Szyk-Warszyńska, E.Jarek, P.Warszyński "Adsorption of α - and β -Casein at Free Interface and in Polyelectrolyte Multilayer Structures", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
151. T.Ślęzak, S.Stankov, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, R.Rueffer, J. Korecki "Magnetism of Ultra-Thin Iron Films Seen by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", Abstracts. European Conf. Physics of Magnetism 2008, Poznań 2008, p.25 [ISBN 83-922407-5-8]
152. T.Ślęzak, S.Stankov, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, B.Laenens, N.Planckaert, M.Rennhofer, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, R.Rüffer, J.Korecki "Magnetism of Ultra-Thin Iron Films Seen by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", Program, Abstracts and List of Participants Book. Ogólnopolskie Seminarium Spektroskopii Mössbauerowskiej OSSM-2008, Koninki 2008, p.68
153. T.Ślęzak, S.Stankov, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, B.Laenens, N.Planckaert, M.Rennhofer, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, R.Rüffer, J.Korecki "Depth-Resolved Magnetization Structure at the Spin Reorientation Transition in Fe/W(110) Ultra-Thin Films", Programme Book. 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008, p.55

154. M.Śliwa, R.Grabowski, J.Plona, J.Mizera, E.M.Serwicka "Direct Synthesis of Dimethyl Ether from the Syngas over Bifunctional Catalysts", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.196 [ISBN 978-83-60514-08-5]
155. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "Theoretical Description of Properties of Active Sites at the (011)Mo₂ Surface", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.98 [ISBN 978-83-60514-08-5]
156. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "Electronic Properties of the Active Sites at the (011)MoO₂ Surface. Periodic and Cluster DFT Quantum Chemical Studies", Book of Abstracts. 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, (G.P.Petrova et al., Eds.), Sofia 2008, p.35 [ISBN 978-954-323-396-0]
157. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "Description of Active Sites Present at the (011)MoO₂ Surface. Periodic and Cluster DFT Quantum Chemical Studies", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P45 [ISBN 978-83-921060-5-0]
158. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Oxygen Activation at Molybdenum Hetero- and Homo-Catalysts. DFT Cluster Model Studies", Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V (A.Eilmes, J.Korchowiec, Eds.), Kraków 2008, P46 [ISBN 978-83-921060-5-0]
159. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko, R.Gryboś "Electronic Properties of the Active Sites Present at the (011)MoO₂ Surface. Periodic and Cluster DFT Quantum Chemical Studies", Verhandlungen, 72nd Annual Meeting 2008 and DPG-Spring Meeting of the Condensed Matter Section, Berlin 2008, p.655 [ISSN 0420-0195]
160. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "The Influence of Metal Coordination on Formation and Electronic Properties of Oxo Species. DFT Cluster Model Study", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.99 [ISBN 978-83-60514-08-5]
161. A.Tripković, S.Gojković, K.Popović, J.Lović, A.Kowal "Electrooxidation of Formic Acid on Unmodified and Bi Modified Pt₂Ru₃ Nanocatalyst", Book of Abstracts. RSE-SEE 2008 (V.Horvat-Radosević, Ed.), Croatian Society of Chemical Engineers, Zagreb 2008, p.172-173 [ISBN 978-953-6894-33-8]
162. A.Tripković, K.Popović, R.Stefanović, A.Kowal "Electrochemical Oxidation of Formic Acid on PtBi Alloy", Book of Abstracts. RSE-SEE 2008 (V.Horvat-Radosević, Ed.), Croatian Society of Chemical Engineers, Zagreb 2008, p.177-179 [ISBN 978-953-6894-33-8]
163. D.Tripković, S.Stevanović, A.Tripković, A.Kowal, V.M.Jovanović "Influence of Morphology of Pt Electrodeposited on Glassy Carbon Support on Formic Acid Oxidation", Book of Abstracts. RSE-SEE 2008 (V.Horvat-Radosević, Ed.), Croatian Society of Chemical Engineers, Zagreb 2008, p.32-34 [ISBN 978-953-6894-33-8]

164. A.Trybała, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "The Effect of Anchoring PEI Layer on the Build-Up of Polyelectrolyte Multilayers Films", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.540 [ISBN 978-83-60514-08-5]
165. A.Trybała, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Deposition of Core-Polyelectrolyte Shell Structures at Heterogeneous Surfaces Modified by Polyelectrolyte Multilayers", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.230 [ISBN 978-83-60514-08-5]
166. A.Trybała, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Formation of Polyelectrolyte Multilayer Films at Heterogeneous Surfaces", Book of Abstracts. 7th Int. Symp. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008, p.105
167. W.Turek, A.Śniechota, J.Haber "Dehydrogenation of Cyclohexane as a Measure of Redox Properties of Oxide Catalysts", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.209 [ISBN 978-83-60514-08-5]
168. P.Warszyński "Modyfikacja powierzchni materiałów poprzez adsorpcję wielowarstwowych filmów polielektrolitowych", Materiały konferencyjne. 1. Krajowa Konf. Nano i Mikromechaniki, Krasieczyn 2008
169. P.Warszyński, G.Para, E.Jarek "Ion specific Effects in Adsorption of Ionic Surfactants", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, O169
170. P.Warszyński, M.Zembala, M.Kolasinska, M.Krasowska, A.Trybała, J.Zawala, K.Małyśa "Wetting of Polyelectrolyte Modified Surfaces: Contact Angle, Three Phase Contact Formation, Correlation with Electric Properties", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, 0104
171. M.Wasilewska, B.Jachimska, Z.Adamczyk "Bulk Characteristic of Globular Proteins by Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility and Dynamic Viscosity Measurements", Book of Abstracts. 7th Int. Symp. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008, p.176
172. P.Weroński "Modeling of Attractive and Repulsive Electrostatic Interaction in the Process of Multilayer Random Sequential Adsorption", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.184 [ISBN 978-83-60514-08-5]
173. D.Wilgocka-Ślęzak, T.Ślęzak, N.Spiridis, K.Freindl, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, J.Korecki "The Thickness-Induced Polar Spin Reorientation Transition in Ultra-Thin Fe(001) Films on Au(001)V, Programme Book. 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008, p.235
174. M.Witko, P.Hejduk, J.Goclon "The Role of V₂O₅ Low-Index Surfaces in Catalytic Processes-Cluster DFT Studies", Book of Abstracts. 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008, p.372 [ISBN: 89-955266-5-1 93510]

175. D.Wodka, A.Michalska, A.Struska, R.P.Socha, P.Nowak "Preparation of TiO₂ for Photocatalytic Applications – Transition-Metal Doped TiO₂ Gels", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.304 [ISBN 978-83-60514-08-5]
176. D.Wodka, A.Pacuła, P. Nowak "Oxygen Reduction Catalysis by Supported Transition Metal Compounds", Poster Abstract and Programme. Faraday Discussion 140: Electrocatalysis – Theory and Experiment at the Interface, Southampton 2008, P27.
177. K.Wojciechowski, M.Kucharek, P.Warszyński, W.Wróblewski "Interfacial Tension Studies of CTAB at Toluene-Aqueous Interface in the presence of Bromide Ions", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.119 [ISBN 978-83-60514-08-5]
178. S.Wybraniec, P.Stalica, T.Michałowski, K.Mitka, P.Kowalski, M.Szaleniec "Inversion of Elution Order of Diastereomers in Methyl Esters of Betacyanins and Decarboxylated Betacyanins Analysed in RP-HPLC", Conf. Mater. of 27th Int. Symp. on Chromatography, Münster 2008, M-LC-30
179. S.Wybraniec, P.Stalica, A.Spórna, M.Szaleniec, G.Jerzy, T.Michałowski "Zastosowanie technik chromatograficznych w analityce pochodnych betainy", Mater. 3. Konf. Analityczne Zastosowania Chromatografii Cieczowej, Warszawa 2008, p.60
180. S.Wybraniec, P.Stalica, M.Szaleniec, G.Jerzy "Chromatograficzne badania betacyjanin w owocach *Chenopodium foliosum* techniką LC-ESI-MS", Mater. 3. Konf. Analityczne Zastosowania Chromatografii Cieczowej, Warszawa 2008, p.61
181. S.Wybraniec, P.Stalica, M.Szaleniec, G.Jerzy "Identyfikacja betalain *Chenopodium quinoa* techniką LC-ESI-MS", Mater. 3. Konf. Analityczne Zastosowania Chromatografii Cieczowej, Warszawa 2008, p.62
182. E.Zackiewicz, R.P.Socha, N.Spiridis, J.Korecki "STM and XPS Studies of Gold Nanostructures on Iron and Oxygen Rich Fe₃O₄(001) Surfaces", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.325 [ISBN 978-83-60514-08-5]
183. M.Zajac, M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, K.Freindl, J.Korecki "Magnetic and Structural Properties of Epitaxial Fe/Fe₃O₄/Fe Trilayers", Programme Book. 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008, p.53
184. M.Zajac, T.Ślęzak, M.Ślęzak, N.Spiridis, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, K.Matlak, E.Zackiewicz, J. Korecki "Oxygen Adsorption on Fe(110)", Programme Book. 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008, p.234
185. J.Załucka, P.Kozyra, M.Mitoraj, E.Broclawik, J.Datka "Cu⁺, Ag⁺ and Na⁺ Cationic Sites in ZSM-5 Interacting with Benzene: DFT Modelling and IR Studies", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.102 [ISBN 978-83-60514-08-5]

186. J.Zawała, T.Dąbroś, K.Małyśa "Degree of Energy Transfer During the Bubble Bouncing from Water/Gas and Water/Solid Interfaces", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.126 [ISBN 978-83-60514-08-5]
187. J.Zawała, J.Drzymała, K.Małyśa "Surface Electric Charge and the Three Phase Contact Formation by the cColliding Bubble", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, O4
188. J.Zawała, D.Kowalczyk, R.Świelik, K.Małyśa "Surfactants in Local Water Reservoirs and the Bubble Velocity as the Method for Detection the Contamination Degree", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, P167
189. J.Zawała, A.Niecikowska, R.Miller, K.Małyśa "Influence of the Bubble Motion in Cationic Surfactant Solutions on Time of the Three Phase Contact Formation at Mica Surface", Abstracts. 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008, P197
190. J.Zawała, R.Todorov, A.Olszwska, D.Exerova K.Małyśa "Influence of pH on the BSA Ability to Affect the Bubble Rising Velocity and Stability of Foam and Wetting Films", Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology' (Z.Adamczyk et al., Eds.), IkiFP PAN. Kraków 2008, p.557 [ISBN 978-83-60514-08-5]
191. V.Zazhigalov, D.Brazhyk, Y.Zaitsev, A.Kowal, K.Wieczorek-Ciurowa "Nano-Dispersed Carbon Supported MeO_x/C Catalysts for Environmental Protection", Conf. Proc. CarboCat-III (D.Su, Ed.), Berlin 2008, p.114
192. A.Zięba, T.Kasza, A.Bielański A.Drelinkiewicz "An Introductory Study of Bio-Fuel Synthesis in Treansestrification of Natural Iols. The Choice of Catalysts", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2008, p.326 [ISBN 978-83-60514-08-5]
193. A.Zięba, T.Kasza, L.Matachowski, A.Pacuła, A.Bielański, E.Serwicka-Bahranowska, A.Drelinkiewicz "Bio-Fuel Synthesis in Transestrification of cCastor Oil Using Heteropolyacid-Based Solid Catalysts", Proc. 5th Int. Conf. on Enviromental Catalysis, Belfast 2008
194. M.Zimowska, M.Bazarnik, J.Bazarnik, K.Bahranowski "Modification of FSM-16 Mesoporous Materials Structure – Preliminary Results", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.190 [ISSN 1896-2203]
195. M.Zimowska, R.Dula, J.Plona, B.Napruszewska, R.Janik, T.Machej, E.M.Serwicka "Synthesis, Physicochemical Characterization and Catalytic Properties of Hydrotalcite-Like Cu-Mn-Al Compounds", Abstracts. 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008, Mineralogia Special Papers, Vol.33, p.191 [ISSN 1896-2203]

196. M.Zimowska, J.Morgiel, Z.Czuła "Synthesis od Hierarchical Mesoporous SBA-15 Material by Incorporation of Carbon Black Nanoparticles", Conf. Proc. Catalysis for Society (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, p.309 [ISBN 978-83-60514-08-5]

INNE OPRACOWANIA

1. A.Bielański, Nagranie dźwiękowe wspomnień 1912-2008 dla Archiwum Historii Mówionej Ośrodek „Karta”, sygnatura AHM-742, czas nagrania 5h 34 min. Osoba nagrywająca Joanna Komperda.
2. A.Drelinkiewicz, recenzje podręczników szkolnych z zakresu chemii, in: "Prace Komisji do Oceny Podręczników Szkolnych. Tom VI", PAU, Kraków 2008, p. 225-263 [ISSN 1733-5175]
3. J.Kryściak-Czerwenka, opracowanie:
Polityki Jakości i Deklaracji CezaŚ
Księgi Jakości CezaŚ
Procedur Ogólnych CezaŚ (PO):
 - PO-01 "Zarządzanie dokumentami i zapisami"
 - PO-02 "Personel i szkolenia"
 - PO-03 "Postępowanie z przyrządami pomiarowymi"
 - PO-04 "Pobieranie i przyjmowanie próbek do badań"
 - PO-05 "Postępowanie z próbkami do badań"
 - PO-06 "Postępowanie z materiałami pomocniczymi"
 - PO-07 „Oferty, zlecenia, i współpraca ze zleciodawcą"
 - PO-08 "Doskonalenie systemu zarządzania, działania korygujące i zapobiegawcze, przegląd systemu zarządzania"
 - PO-09 "Audyty wewnętrzne"
 - PO-10 "Walidacja i szacowanie niepewności"
4. J.Kryściak-Czerwenka, J.Janas, opracowanie:
Procedur Badawczych CezaŚ (PB):
 - PB-01 "Pomiary własności fizykochemicznych oraz składu nieenergetycznych gazów odlotowych za pomocą urządzenia TESTO 350M/XL"
 - PB-02 "Oznaczenie stężenia pary wodnej i CO2 metodą FT-IR za pomocą anlizatora Gasset DX-4000"
 - PB-03 "Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą chromatografii gazowej z detekcją fotojonizacyjną w warunkach in-situ za pomocą chromatografu gazowego Voyager"
 - PB-04 "Oznaczanie epichlorohydryny metodą FTIR na aparacie Gasset DX-4000"
 - PB-05 "Oznaczanie par nafty, metodą chromatografii gazowej z detekcją płomieniowo-jonizacyjną przy wykorzystaniu atestowanych rurek adsorpcyjnych z węglem aktywnym"
 - PB-06 „Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą FT-IR w warunkach in-situ za pomocą analizatora Gasset DX-4000"

Ekspertyzy

5. Ł.Bratasz "Analiza mikroklimatu groty Św. Pawła w Efezie i opracowanie koncepcji ograniczenia kondensacji wody na znajdujących się w jej wnętrzach wczesnochrześcijańskich freskach", dla Austriackiej Misji Archeologicznej w Efezie
6. J.Janas, J.Kryściak-Czerwenka, ekspertyza środowiskowa dla budynku i gruntu nieruchomości położonej przy ul. Bohaterów Września 80 w Krakowie dla Banku Polska Kasa Opieki S.A. w Warszawie
7. R.Kozłowski, Ł.Bratasz "Dokumentacja konserwatorska zawierająca ocenę zagrożeń podziemi Katedry Metropolitalnej na Wawelu", dla Społecznego Komitetu Ochrony Zabytków Krakowa
8. R.Kozłowski, Ł.Bratasz "Diagnoza przyczyn uszkodzeń mechanicznych zabytkowej skrzyni z laki japońskiej tzw. 'Mazarin chest' ze zbiorów Muzeum Wiktorii i Alberta w Londynie", dla Muzeum Wiktorii i Alberta w Londynie w ramach wieloletniego programu badań i konserwacji skrzyni.
9. P.Nowak, M.Mosiąlek, ekspertyza dla Sądu Rejonowego dla Krakowa-Śródmieścia
10. P.Nowak, A.Pacuła, ekspertyza dla Sądu Rejonowego dla Krakowa-Śródmieścia

PRACE W DRUKU

1. Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Nattich "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous and Patterned Surfaces", Advance (in print)
2. Z.Adamczyk, A.Bratak-Skicki, P.Warszyński, M.Nattich "Structure of poly (Acrylic) acid in Electrolyte Solutions and on Surfaces Determined from Simulations and Viscosity Measurements", Proc. Polymer Processing Society 24th Annual Meeting, Salerno 2008 (in print)
3. Z.Adamczyk, B.Jachimska, T.Jasiński, P.Warszyński, M.Wasilewska "Structure of poly (Sodium 4-styrenesulfonate) (PSS) in Electrolyte Solutions: Theoretical Modeling and Measurements", Colloids Surf. A, (in print)
4. Z.Adamczyk, M.Nattich, A.Bratak-Skicki "Adsorption and Deposition of Particles, Polyelectrolytes and Biopolymers", Book Nanoscience (in print)
5. W.Barzyk, K. Więclaw, S. Campagna, E. Rogalska "The Affinity of Two Antimicrobial Peptides Derived from Bovine Milk Proteins for Model Lipid Membranes", Colloids Surf. A (in print)
6. A.Drelinkiewicz, W.Stanuch, A.Knapik, A.Ghanem, R.Kosydar, A.Bukowska, W.Bukowski "Amine-Groups Functionalized Gel-Type Resin Supported Pd Catalysts. Physicochemical and Catalytic Properties in Hydrogenation of Alkynes", J. Mol. Catal. A, (in print)

7. D.Duraczynska, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz, Z.Olejniczak "Novel Ruthenium(II) Phosphine/Mesoporous Silica Catalysts: the Impact of Active Phase Loading on Catalytic Activity in Hydrogenation of Phenylacetylene", *Organometallics*, (in print)
8. J.Haber "The Role of Catalysis in Determining Men's Quality of Life", *Topics Catal.*, (in print)
9. A.Kowal, M.Li, M.Shao, K.Sasaki, M.B.Vukmirovi, J.Zhang, N.S.Marinkovic, P.Liu, A.I.Frenkel, R.R.Adzic "A Ternary Pt/Rh/SnO₂ Electrocatalysts for Oxidizing Ethanol to CO₂", *Nature Mater.*, (2009) (available on-line)
10. M.Krzan, K.Małysa "Influence of Solution pH and Electrolyte Presence on Bubble Velocity in Anionic Surfactant Solutions", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, (in print)
11. K.Małysa, J.Zawała, M.Krzan, M.Krasowska "Bubble Rising in Solutions, Local and Terminal Velocities, Shape Variations and Collisions with Free Surface", in: "Bubble and Drops Interfaces (in print)
12. K.Pamin, B.Jachimska, K.Onik, J.Połtowicz, R.Grabowski "Electrostatic Self-Assembly of Polyoxometalates on Chitosan as Catalysts of Oxidation of Cyclic Hydrocarbons", *Catal. Lett.*, (in print)
13. W.Płaziński, W.Rudziński "Modeling the Effect of pH on Kinetics of Heavy Metal Ion Biosorption. A Theoretical Approach Based on the Statistical Rate Theory", *Langmuir*, (in print)
14. J.Połtowicz, E.Bielańska, M.Zimowska, E.M.Serwicka, R.Mokaya, Y.Xia "Microporosity in Mesoporous SBA-15 Supports - a Factor Influencing the Catalytic Performance of Immobilized Metalloporphyrin", *Catal.Today*, (in print)
15. J.Rakoczy, K.Kupiec, E.Lalik "Study of Bioethanol Dehydration by Cyclic Adsorption-Desorption Process", *Polish J. Environ. Stud.*, (in print)
16. W.Rudziński, W.Płaziński "On the Applicability of the Pseudo-Second Order Equation to Represent the Kinetics of Adsorption at Solid/Solution Interfaces: a Theoretical Analysis Based on the Statistical Rate Theory", *Adsorption*, (in print)
17. M.Wasilewska, Z.Adamczyk, B.Jachimska "Structure of Fibrinogen in Electrolyte Solutions Derived from PCS and Viscosity Measurements", *Langmuir*, (in print)
18. A.Zięba, L.Matachowski, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Methanolysis of Castor Oil Catalysed by Solid Potassium and Cesium Salts of 12-Tungstophosphoric Acid", *Catal. Lett.*, (in print)
19. M.Zimowska, R.Dula, J.Plona, B.Napruszewska, R.Janik, T.Machej, J.Gurgul, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-Like Cu-Mn-Al Compounds as precursors of Mixed Oxide Catalysts for the Total Combustion of Toluene", *Appl. Catal. B*, (in print)

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. "Conference Proceedings. Catalysis for Society. XLth Annual Polish Conference on Catalysis. 40th years of ICSC PAS, Krakow, May 11th-15th, 2008" (B.Sulikowski, Ł.Mokrzycki, Eds.), IKiFP PAN, Kraków 2008, pp.335 [ISBN 978-83-60514-06-1]
2. "Materiały XV. Forum Zeolitowego, 16-21 czerwca 2008, Kocierz. Proceedings of XVth Zeolite Forum, June 16th-21st, 2008, Kocierz" (M.Derewiński, V.Pashkova, Eds.), Polskie Towarzystwo Zeolitowe i IKiFP PAN, Kraków 2008, pp.396 [ISBN 978-83-60514-07-8]
3. "Book of Abstracts. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society, Krakow, August 31st-September 5th, 2008. COST D43 Workshop: Colloid and Surface Science for Nanotechnology, Krakow, September 2nd-4th, 2008" (Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Nattich, K.Szatkowska, Eds.), IKiFP PAN, Kraków, 2008, pp. 653 [ISBN 978-83-60514-08-5]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY OTRZYMANE

1. K.Bahranowski, E.Serwicka-Bahranowska, T.Machej, A.Michalik, R.Janik, H.Piekarska-Sadowska, J.Janas "Sposób wytwarzania katalizatora do pełnego utleniania zanieczyszczeń organicznych zawierających chlor", Polish Patent, PL 199571 (31.10.2008)
2. A.J.Groszek, J.Haber, E.Lalik "Method for Activating a Catalyst", British Patent, GB 2430394 (14. 05.2008)
3. K.Lunkenheimer, K.Małysa, G.Wienskol, M.Barańska "Method and Procedure for Swift Characterization of Foamability and Foam Stability", European Patent, EU 1416261 (16.01.2008)
4. L.Matachowski, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber, A.Janitz, K.Magiełko, S.Szarlik, S.Piechota "Sposób utleniania cykloheksanu", Polish Patent, PL 198563 (3.10.2008)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

4. A.J.Groszek, J.Haber, E.Lalik "A Method of Activating of a Composition", International PTC Patent Application No. PCT/GB2008/003265 (25 09 2008)
5. R.Bredesen, Ch.Simon, Y.Yuan, I.Kumakiri, P.Warszyński, P.Nowak "Process and System for Removal of Organics in Liquids", Norway Patent Application, 20083578 (18.08.2008)
6. J.Połtowicz, K.Pamin, E.Serwicka-Bahranowska "Sposób epoksydacji propylenu", Polish Patent Application, P 386720 (08.12.2008)

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z.Adamczyk, J.Barbasz, M.Nattich "Mechanisms of Nanoparticle and Protein Deposition at Heterogeneous and Patterned Surfaces", US-Poland Workshop on Interfacial Phenomena and Advanced Materials, Gdańsk 2008
2. Z.Adamczyk "Mechanism and Kinetics of Particle Adsorption at Interfaces", Workshop on Wetting and Surface Modification, Sudomie 2008
3. A.Bielański "Woda, związek bardzo pospolity", 40. Sesja Dydaktyczna dla nauczycieli chemii i przedmiotów przyrodniczych, Kraków 2008
4. Ł.Bratasz "Climate and Wood", Int. Course on Wood Conservation Technology, Oslo, 2008
5. E.Brocławik, P.Rejmak, P.Kozyra, J.Załucka, M.Mitoraj "Theoretical Modeling of Smart Catalytic Activity of Copper Centers in Zeolites: from Electron Density Flow towards Activation", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008
6. J.Haber "The Role of Catalysis in Determining Men's Quality of Life", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
7. J.Haber "Reactivity of Oxygen at Interfaces", Workshop on Surface/Adsorbed Oxygen on Metal Oxides; Role in Gas Sensing and Catalysis", GOSPEL EU Network of Excellence in Artificial Olfaction, Tübingen 2008
8. J.Korecki "Depth-Resolved Local Magnetization Structure Studied with Nuclear Spectroscopies", Workshop on High Temporal and Spatial Resolution Studies of Magnetic Nanostructures, Augustów 2008
9. A.Kowal, K.Wieczorek-Ciurowa, M.Pavlović, Č.Lačnjevac, M.Gligorić "Modified SnO₂ Anodes Used for Oxidative Treatment of Organic Pollutants", Int. Conf. "Water Supply and Sewerage '08", Zlatibor 2008
10. A.Kowal "Rozwój nowoczesnych ogniw paliwowych", Konf. "Innowacyjne i przyjazne dla środowiska systemy przeróbcze surowców mineralnych - Komeko 2008, Szczyrk 2008
11. A.Kowal, R.Adzic, K.-S.Lee, P.Olszewski, Y.-E.Sung "Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO₂ and Pt-Rh-SnO₂ Electrocatalysts for Ehtanol Oxidation", Int. Conf. 10th YUCORR, Tara 2008
12. A.Kowal "Nanotechnologia dla ogniw paliwowych: DEFC – ogniwo paliwowe zasilane etanolem", Konf. "Czysta energia - czyste środowisko 2008", Kraków, 2008
13. I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon, K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Catalytic Membrane Reactors for the Removal of Organic Matter in Water", 10th Int. Conf. on Inorganic Membranes (ICIM), Tokyo 2008

14. K.Małysa, J.Zawała, "On the Dynamics of Liquid Film Formation and Rupture at Various Interfaces by the Colliding Bubble", Conf. "Nanoscale Phenomena and Structures", Sofia 2008
15. K.Małysa, "Adsorption at the Interface of the Rising Bubbles as a Method for Detecting of Organic Contaminants in Water", 1^{re} Conf. Int. sur la Thermodynamique de L'Environnement et le Developpement Durable CITEDD '2008, Tlemcen 2008
16. P.Nowak "Elektrokataliza w ogniach paliwowych", 2. Szkoła Letnia Polskiego Stowarzyszenia Wodoru i Ogni Paliwowych, Kraków 2008
17. P.Nowak, A.Gucwa "Influence of Surfactant Adsorption on the Leaching of Copper Sulfides", Conf. "Quo vadis hydrometallurgy 5", Herłany 2008
18. W.Płaziński, W.Rudziński "Biosorption in Environmental Protection", 6th Int. Symp. on Chromatography of Natural Products, Lublin 2008
19. E.M.Serwicka "Education in Applied Catalysis - Past Achievements and Future Goals", Kick-off Meeting for Granted ACENET Proposals, Amsterdam 2008
20. J.Superata "Carbon Nanomaterials as Chemsensor Components; Dispersed vs. Immobilized Preparations", IDECAT WP5 Workshop, Ghent 2008
21. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Pawul, B.Kozik, M.Witko "Ethylbenzene Dehydrogenase – Stereoselective Oxidation of Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Compounds. Theory and Experiment", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
22. M.Szaleniec "Sieci Neuronowe i regresja wieloraka – czyli jak określić złożoność w badaniach naukowych", Konf. Zastosowania statystyki i data mining w badaniach naukowych, Warszawa 2008
23. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "Reaction Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase – Where Experiment Meets Theory", 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, Varna 2008
24. P.Warszyński "Modyfikacja powierzchni materiałów poprzez adsorpcję wielowarstwowych filmów polielektrolitowych", 1. Krajowa Konf. Nano i Mikromechaniki, Krasiczyn 2008
25. P.Warszyński, M.Zembala, M.Kolasinska, M.Krasowska, A.Trybala, J.Zawała, K.Małysa "Wetting of Polyelectrolyte Modified Surfaces: Contact Angle, Three Phase Contact Formation, Correlation with Electric Properties", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
26. M.Witko "Active Sites at Vanadium Pentoxide Surfaces. An initio DFT Studies", Conf. on Nanocatalysis: Fundamental & Applications, Dalian 2008

REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z.Adamczyk, A.Brątek, A.Michna, M.Nattich "Streaming Potential Characterization of Particle and Polyelectrolyte Adsorption Layers at Mica", Workshop of Cost Action D43 "Functionalized Materials and Interfaces", Berlin 2008
2. Z.Adamczyk, A.Brątek-Skicki, A.Michna, M.Nattich "Mono- and Bilayers of Macroions on Mica Studied by the Streaming Potential Method", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
3. K.Banaś, V.Pashkova, A.Węgrzynowicz, M.Derewiński "Highly Porous Multimodal Materials Assembled from Protozeolitic Building Units of MFI Type", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008
4. M.Bazarnik, M.Zimowska, K.Bahranowski, E.Serwicka "Synthetic Kanemite as a Base of Mesoporous Catalysts of FSM type", 9th Int. Geological Conf. Ph.D. Students and Young Scientists, Zawoja-Herlany 2008
5. 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 "Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organs (SENSORGAN)", 8th EC Commission Conf. on Research for Protection, Conservation and Enhancement of Cultural Heritage "Cultural Heritage Research Meets Practice", Ljubljana 2008
6. E.Brocławik, T.Borowski, M.Radoń "Smart Catalysis on Enzymes with Iron-oxo Core: Theory Behind Electronic Structure", 8th Congr. of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2008, Sydney 2008
7. Ł.Bratasz, S.Jakiela "Acoustic Emission Sensor for Direct Tracing of Physical Damage in Organs", Conf. the Pipe Organ; the Secular Journey at the Service for Liturgy, Vatican 2008
8. Ł.Bratasz, S.Jakiela, Ł.Lasyk, R.Kozłowski "Direct Monitoring of Damage in Clay-Containing Sandstones by Acoustic Emission", 11th Int. Congr. on Deterioration and Conservation of Stone, Toruń, 2008
9. Ł.Bratasz, S.Jakiela, M.Łukomski, R.Kozłowski "Acoustic Emission Sensor for Direct Tracing of Damage in Historic Objects", 9th Int. Conf. Art2008: Non-Destructive Investigations and Microanalysis for the Diagnostics and Conservation of Cultural and Environmental Heritage, Jerusalem 2008
10. Ł.Bratasz, R.Kozłowski, A.Kozłowska, B.Rachwał "Sorption of Moisture and Dimensional Change of Wood Species Used in Historic Objects", COST IE0601 Workshop, Braga 2008
11. Ł.Bratasz, R.Kozłowski, A.Kozłowska, S.Rivers "Conservation of the Mazarin Chest: Structural Response of Japanese Lacquer to Variations in Relative Humidity", 15th Triennial Conf. ICOM Committee for Conservation, New Delhi 2008

12. A.Burkat-Dulak, M.Derewiński "Preparation of MFI Type Zeolite with Hierarchical Pores System as New Supports for Deposition of Metal Clusters", 4th Federation of European Zeolite Associations Conf., Paris 2008
13. A.Burkat-Dulak, M.Derewiński "New Support for Deposition of Highly Dispersed Metal Clusters Based on MFI Zeolite Crystals with Meso-/Macropores", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008
14. M.Derewiński "Design of New Catalysts Based on Nanostructured Micro- and Mesoporous Solid Acids for Environmentally Clean Diesel Fuel", IDECAT WP5 Workshop, Ghent 2008
15. P.Dyshlovenko, P.Warszyński "Electrostatic Interactions of Colloid Particles at Charged Interface in 2D and 3D", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
16. S.Dźwigaj, J.Janas, J.Mizera, J.Gurgul, R.P.Socha, T.Shishido, M.Che "Role of Monomolecular Cu(II) Species of CuSiBEA Zeolite in the SCR of NO by Ethanol", Annual Meeting of GDRI. Catalysis for Environment: Depollution, Renewable Energy and Clean Fuels, Zakopane 2008
17. M.Elźbieciak, M.Kolasińska, L.Szyk-Warszyńska, A.Trybała, J.Superata, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe - wielofunkcyjny materiał dla nanotechnologii", 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008
18. M.Filek, M.Zembala "Wykorzystanie pomiarów potencjału elektrokinetycznego w fizjologii roślin", Konf. "Metody biofizyczne w biologii eksperymentalnej roślin", Kazimierz Dolny 2008
19. U.Filek, B.Sulikowski "Epoxidation of Norbornene over Supported $H_4PVMo_{11}O_{40}$ Catalysts", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008
20. U.Filek, B.Sulikowski A.Bressel, M.Hunger " $H_3PW_{12}O_{40}$, $H_3PMo_{12}O_{40}$, $H_4PV_1Mo_{11}O_{40}$ and Their Aluminium, Gallium and Indium Salts as Catalysts for Liquid Phase Oxidation of Norbornene", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008
21. K.Freindl, N.Spiridis, M.Ślęzak, T.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Zajac J. Korecki "Oxygen Adsorption on Fe(110)", MDN/Dynasync Final Workshop, Reichenau 2008
22. M.Gabrovska, D.Mucha, P.Tzvetkov, J.Krstić, R.Edreva-Kardjieva, D.Jovanović, M.Zimowska "Study of Pd-NiMg/SiO₂ System by *in situ* X-Ray Diffraction Performed under Hydrogen", 6th Int. Conf. of the Chemical Societies of the South-Eastern European Countries, Sofia 2008
23. B.Gawęł, W.Łasocha "Zastosowanie algorytmu kooperatywnego we wskaźnikowaniu dyfraktogramów proszkowych", 50. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2008
24. B.Gawęł, W.Surga, W.Łasocha "X-Ray Diffraction Studies of Transition Metal Molybdates", 11th European Powder Diffraction Conference EPDIC-11, Warsaw 2008

25. Ch.U.Grosse, G.Pascale, S.Simon, M.Krüger, A.Troi, C.Colla, V.Rajčić, M.Łukomski "Recent Advances in Smart Monitoring of Historic Structures", 8th EC Commission Conf. on Research for Protection, Conservation and Enhancement of Cultural Heritage "Cultural Heritage Research Meets Practice", Ljubljana 2008
26. R.Gryboś, T.Kasza, M.Witko "Catalysis in Space Exploration: Water Photodissociation Under Conditions Found on the Moon Surface", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
27. M.Grzywa, W.Nitek, W.Łasocha "Badania rentgenograficzne i fizykochemiczne nieorganicznych, dwujądrowych związków nadtlenowych Mo(VI) i W(VI)", 50. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2008
28. J.Gurgul, K.Łątka, A.W.Pacyna, C.P.Sebastian, R.Pöttgen "¹¹⁹Sn Mössbauer Spectroscopy of Intermetallic HoRhSn Compound", Program, Ogólnopolskie Seminarium Spektroskopii Mössbauerowskiej OSSM-2008, Koninki 2008
29. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption at Low-Indices (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Studies", 72nd Annual Meeting 2008 and DPG-Spring Meeting of the Condensed Matter Section, Berlin 2008
30. B.Jachimska, M.Wasilewska, Z.Adamczyk "Agregacja białek w roztworach wodnych", 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008
31. T.Jasiński, W.Barzyk, K.Lunkenheimer, P.Warszyński "Surface Potential Isotherms of Nonionic Surfactants; Experiment v.s. Molecular Dynamic Simulations", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
32. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Utlenianie cyklooktanu w obecności soli organicznych modyfikowanych heteropolikwasów", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
33. J. Korecki "Surface Science at ICSC", COST D36 Meeting, Nice 2008
34. J.Korecki, K.Freindl, W.Karaś, K.Matlak, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Zajac "Hyperfine Field at the Fe(001)/MgO(001)", MDN/Dynasync Final Workshop, Reichenau 2008
35. A.Kowal, K.-S.Lee, S.-J.Yoo, P.Olszewski, Y.-E.Sung, R.Adzic "Synthesis and Properties of Oxide Modified Pt and Pt-Rh Alloy. Electrocatalysts for Ethanol Oxidation", 1st Regional Symp. on Electrochemistry RSE-SEE, Rovinj 2008
36. R.Kozłowski "ROCEM and ROCARE Projects: Re-Establishing Roman Cements to the Conservation Practice" Workshop "Preservation of Concrete Rendered Buildings of the 19th Century", Oslo 2008
37. P.Kozyra, J.Zalucka, M.Mitoraj, E.Broclawik, J.Datks "Interaction of Cu⁺ and Ag⁺ Sites in ZSM-5 with Benzene: Application of NOCV", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008

38. I.Kumakiri, J.Yang, J.Halizovic, Ø.Vistad, A.Karlsson, C.Simon, K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Catalytic Membrane Contactors for Water Treatment", ICIM Post-Symposium on Catalytic Membrane Reactors, Mt. Fuji 2008
39. I.Kumakiri, J.Yang, C.Simon, K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Catalytic Membrane Contactors for Water Treatment", 10th Int. Conf. on Inorganic Membranes (ICIM), Tokyo 2008
40. Ł.Lasyk, M.Łukomski, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Vibration as a Hazard During the Transportation of Canvas Paintings", London Congr. of the Int. Institute of Conservation of Historic and Artistic Works 'Conservation and Access', London, 2008
41. W.Łasocha "Badania strukturalne wybranych farmaceutyków metodami dyfraktometrii proszkowej", Seminarium XRD, Zakopane 2008
42. W.Łasocha, M.Grzywa, W.Nitek, B.Łasocha, B.Gawel, A.Rafalska-Łasocha "Octamolybdates - Promising Materials for Industry and Medicine", 21st Congress of International Union of Crystallography, Osaka 2008, P09.03.27
43. W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania związków gąbki protonowej DMAN z wybranymi kwasami organicznymi", 50. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2008
44. M.Łukomski, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Electronic Speckle Pattern Interferometry (ESPI) in Analysis of the Climate-Induced Damage of Painted Wood Surfaces", Workshop Optical Coherence Tomography for Examination of Art, Toruń 2008
45. M.Łukomski, Ł.Lasyk, Ł.Bratasz, R.Kozłowski "Climate-Induced Response of Painted Wood Surfaces: Monitoring by Laser Techniques", 9th Int. Conf. Art2008, Non-Destructive Investigations and Microanalysis for the Diagnostics and Conservation of Cultural and Environmental Heritage, Jerusalem 2008
46. K.Małyś "Dynamics of the Bubble Collisions with Various Interfaces", COST P21 "Physics of Droplets" Meeting, Brussels 2008
47. A.Micek-Ilnicka "The Role of Water in Catalytic ETBE Synthesis on Heteropolyacids", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008
48. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski, Z.Olejniczak "Isomerization of α -Pinene over Desilicated ZSM-5, ZSM-12 and MCM-22 Zeolites", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008
49. M.Odlyha, S.Jakieła, J.M.Slater, R.Campana, C. Theodorakopoulos, C.J.Bergsten, A.Cavicchioli, D.L.A.de Faria, A.Niklasson, J.E.Svensson, T.Gronfort, E.Dahlin, M.Scharff "The Monitoring of Indoor Museum Environments and the Impact of their Corrosivity on Complex Organic Materials", 8th EC Commission Conf. on Research for Protection, Conservation and Enhancement of Cultural Heritage "Cultural Heritage Research Meets Practice", Ljubljana 2008

50. M.Odlyha, S.Jakiela, C.Theodorakopoulos, J.M.Slater, A.Caviccioli, D.L.A.de Faria, A.Niklasson, A.Schieweck, D.Thickett "The Application and Further Development of Piezoelectric Quartz Crystal(PQC)-Based Dosimeters for Monitoring Microclimates", 8th Indoor Air Quality 2008 Meeting, Vienna 2008
51. V.Pashkova, E.Wloch, B.Sulikowski, M.Derewinski "Composite Systems Containig MFI Nanodomains Based on SBA-15 Mesoporous Material", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008
52. W.Płaziński, W.Rudziński "Modelowanie wpływu pH na równowagę i kinetykę procesu biosorpcji jonów metali ciężkich", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
53. J.Połtowicz, K.Pamin, E.Tabor, G.Pozzi, J.Haber "Fluorous Catalysis without Fluorous Solvent - Oxidation of Cyclooctane with Perfluorous Salen Metallocomplexes", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
54. A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Analiza pigmentów w obiektach dziedzictwa kulturowego metodami dyfraktometrii proszkowej", Seminarium XRD, Zakopane 2008
55. A.Rafalska-Łasocha, K.Pajak, W.Łasocha "Badania pigmentów w zabytkowych malowidłach siennych metodą dyfraktometrii proszkowej", Konf. Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, Warszawa 2008
56. J.Rakoczy, K.Kupiec, E.Lalik " Study of Bioethanol Dehydration by Cyclic Adsorption-Desorption Process", 6th Int. Conf. Catalysis and Adsorption in Fuel Processing and Environmental Adsorption, Szklarska Poręba 2008
57. N.Spiridis "Vicinal Surfaces as Model Supports", COST Meeting, Nicea 2008
58. B.Sulikowski, Z.Żurek, A.Łukaszczyk, M.Lekka "Ferrierite Type Zeolite Coatings on Metallic Substrates", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008
59. M.Szaleniec "Modelowanie złożoności w chemii metodami statystycznymi z wykorzystaniem pakietu STATISTICA", Konf. Technologie Informacyjne dla Chemików, Kraków 2008
60. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "Reaction Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase – Where Experiment Meets Theory", Book of Abstrats. 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, (G.P.Petrova, eyt al., Eds.), Varna 2008, p.24 [ISBN 978-954-323-396-0]
61. M.Szaleniec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Porphyrin-based Catalysts – Quantum Chemical Study", Book of Abstrats. 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, (G.P.Petrova, et al., Eds.), Varna 2008, p.74 [ISBN 978-954-323-396-0]
62. M.Szaleniec, M.Witko "Biotransformacje węglowodorów alkiloaromatycznych do chiralnych alkoholi drugorzędowych z zastosowaniem dehydrogenazy" Mater. Konf. BUPF 2008 Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym, kosmetycznym i spożywczym, Warszawa 2008

63. L.Szyk-Warszyńska, C.Gergely, E.Jarek "Calcium Uptake by Casein Embedded in Polyelectrolyte Multilayer", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
64. M.Ślęzak, S.Stankov, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, B.Laenens, N.Planckaert, M.Rennhofer, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, R.Rüffer, J.Korecki "Depth-Resolved Magnetization Structure at the Spin Reorientation Transition in Fe/W(110) Ultra-Thin Films", 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008
65. A.Tripković, S.Gojković, K.Popović, J.Lović, A.Kowal "Electrooxidation of Formic Acid on Unmodified and Bi Modified Pt₂Ru₃ Nanocatalyst", 1st Regional Symp. on Electrochemistry RSE-SEE, Rovinj 2008
66. D.Tripković, S.Stevanović, A.Tripković, A.Kowal, V.M.Jovanović "Influence of Morphology of Pt Electrodeposited on Glassy Carbon Support on Formic Acid Oxidation", 1st Regional Symp. on Electrochemistry RSE-SEE, Rovinj 2008
67. A.Trybała, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Deposition of Core-Polyelectrolyte Shell Structures at Heterogeneous Surfaces Modified by Polyelectrolyte Multilayers", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
68. P.Warszyński, G.Para, E.Jarek " Ion specific Effects in Adsorption of Ionic Surfactants", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
69. P.Weroński "Modeling of Attractive and Repulsive Electrostatic Interaction in the Process of Multilayer Random Sequential Adsorption", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
70. K.Wojciechowski, M.Kucharek, P.Warszyński, W.Wróblewski "Interfacial Tension Studies of CTAB at Toluene-Aqueous Interface in the presence of Bromide Ions", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
71. S.Wybraniec, P.Stalica, T.Michałowski, K.Mitka, P.Kowalski, M.Szaleniec "Inversion of Elution Order of Diastereomers in Methyl Esters of Betacyanins and Decarboxylated Betacyanins Analysed in RP-HPLC", Conf. Mater. of 27th Int. Symp. on Chromatography, Münster 2008, M-LC-30
72. M.Zajac, M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, K.Freindl, J.Korecki "Magnetic and Structural Properties of Epitaxial Fe/Fe₃O₄/Fe Trilayers", 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008
73. J.Załucka, P.Kozyra, E.Broclawik, M.Mitoraj, J.Datka "Interaction of Organic Molecules (Benzene, Acetylene, Formaldehyde) with Cu⁺, Ag⁺ and Na⁺ Sites in ZSM-5 – DFT Calculations", 15th Zeolite Forum, Kocierz 2008

74. J.Zawała, T.Dąbroś, K.Małyśa "Degree of Energy Transfer During the Bubble Bouncing from Water/Gas and Water/Solid Interfaces", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
75. J.Zawała, J.Drzymała, K.Małyśa "Surface Electric Charge and the Three Phase Contact Formation by the Colliding Bubble", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
76. J.Zawała, K.Małyśa "Bubble Velocity as a Tool for Monitoring Water Pollution by Organic Contaminants", COST P21 "Physics of Droplets" Meeting, Capri 2008

POSTERY

1. Z.Adamczyk, A.Brątek, E.Szeląg, A.Bastrzyk, J.Barbasz "Colloid Particle Deposition on Heterogeneous Surfaces Produced by Mono- and Bilayers of Polyelectrolytes", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
2. Z.Adamczyk, A.Brątek-Skicki, M.Nattich, J.Barbasz; "Characterization of Polyelectrolyte mono- and Bilayers on Mica by the Streaming Potential and Particle Deposition Methods", Meeting of Polymer Network Group – Polymer Networks: Chemistry, Physics, Biology and Applications – PNG2008, Larnaca 2008
3. Z.Adamczyk, A.Brątek-Skicki, M.Nattich, J.Barbasz, B.Jachimska "Characterization of Polyelectrolyte Mono- and Multilayers on Mica by the Streaming Potential and Particle Deposition Methods", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
4. Z.Adamczyk, M.Nattich, J.Barbasz "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous Surfaces", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
5. Z.Adamczyk, M.Nattich, J.Barbasz "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous and Patterned Surfaces", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
6. Z.Adamczyk, M.Nattich, A.Brątek-Skicki, P.Warszyński "Structure of poly (Acrylic) Acid in Electrolyte Solutions and on Surfaces Determined from Simulations and Viscosity Measurements, The Polymer Processing Society 24th Annual Meeting, Salerno 2008
7. Z.Adamczyk, M.Wasilewska, B.Jachimska "Protein Stability in Electrolyte Solutions", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
8. K.Alexopoulos, P.Hejduk, M.Witko "Theoretical study of the Effect of (001) TiO₂ Anatase Support on V₂O₅", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
9. K.Banaś, V.Pashkova, A.Węgrzynowicz, M.Derewiński "New Highly Porous Catalytic System Prepared by Assembling Protozeolitic Building Units of the MFI Structure", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008

10. J.Barbasz, Z.Adamczyk, M.Nattich "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous and Patterned Surfaces", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
11. J.Barbasz, M.Cieśla "Molecular Dynamics Simulation of Polyelectrolytes (Advanced Model of Lennar-Jones Polymers)", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
12. L.Benco, T.Bucko, R.Gryboś, J.Hafner "Decomposition of N₂O over Fe-fer. A DFT Study", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
13. T.Borowski, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "Reaction Mechanism of Apocarotenoid Oxygenase (ACO). A DFT Study", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
14. T.Borowski, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "Reaction Mechanism of Apocarotenoid Oxygenase (ACO). A DFT Study", Wenner-Gren Foundations Int. Symp. "Theoretical Biochemistry – Methods and Applications", Stockholm 2008
15. T.Borowski, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "Reaction Mechanism of Apocarotenoid Oxygenase (ACO). A DFT Study", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
16. A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk, P.Warszyński, M.Nattich "Polyelectrolyte Structures Determined from Simulations, PCS and Viscosity Measurements", 7th Int. Symp on Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008
17. E.Broclawik, T.Borowski, M.Radoń "Theoretical Description of Smart Catalysis on Active Sites with Iron-oxo Core", 6th Congr. of the Int. Society for Theoretical Chemical Physics, Vancouver 2008
18. A.Burkat-Dulak, L.Lityńska-Dobrzyńska, M.Derewiński "Preparation of New Zeolite Supports for Bifunctional (Acid/Redox) Catalysts", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
19. M.Derewiński, K.Góra-Marek, K.Lazar, J.Datka "Nature of Active Sites in the Fe-TON Zeolites: Mössbauer and IR Studies", 4th Federation of European Zeolite Associations Conf., Paris 2008
20. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, W.Stanuch, J.W.Sobczak A.Bukowska, W Bukowski "Amine-Functionalized Gel-Type Resin as a Support for Palladium Nanoparticles", 5th Polish-Ukrainian Confer. Polymers of Special Applications, Radom-Święta Katarzyna 2008
21. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, W.Stanuch, J.Sobczak, A.Bukowska, W.Bukowski "Żywica metakrylanowo-styrenowa modyfikowana etylenodiaminą jako nośnik dla nanocząstek palladu", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
22. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, W.Stanuch, J.Noworól, A.Bukowska, W.Bukowski "Selective Hydrogenation of Alkynes to Alkenes over Amine-Groups Functional Gel-Type Resin Pd Catalysts", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008

23. A.Drelinkiewicz, A.Knapik, A.Waksmundzka-Góra, W.Stanuch, J.Noworól, A.Bukowska, W.Bukowski, A.Zięba "Selective Hydrogenation of Alkyne to Alkene over Functional Cel-Type Resin-Pd Catalysts", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
24. D.Dronka-Góra, G.Para, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Formation of Interfacial Surfactant-Polyelectrolyte Complexes at Liquid/Liquid Interfaces", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
25. D.Dronka-Góra, K.Szczepanowicz, G.Para, P.Warszyński "Surface Activity of Solutions of Selected Silica Sources", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
26. D.Dronka-Góra, K.Szczepanowicz, G.Para, P.Warszyński "Surface Activity of Solutions of Selected Silica Sources"; 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
27. A.Dudzik, M.Pawul, M.Szaleniec, M.Witko "Stereospecific Oxidation of Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Compounds by Ethylbenzene Dehydrogenase – Chiral Chromatographic Studies", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
28. R.Dula, M.Zimowska, J.Plona, B.Napruszewska, R.Janik, T.Machej, J.Gurgul, R.P.Socha, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-Like Cu-Mn-Al Compounds as Precursors of Mixed Oxide Catalysts for the Total Combustion of Toluene", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
29. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Waksmundzka, A.Drelinkiewicz, Z.Olejniczak "Immobilization of a Cationic Ruthenium(II) Complex in Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Its Application as Hydrogenation Catalyst", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
30. D.Duraczyńska, E.Serwicka-Bahranowska, A.Waksmundzka-Góra, A.Drelinkiewicz, Z.Olejniczak "Immobilization of a Cationic Ru(II) Complex in Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Its Application as Hydrogenation Catalyst", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
31. S.Dźwigaj, J.Janas, J.Gurgul, R.P.Socha, T.Shishido, M.Che "Role of Mononuclear Cu(II) Species of CuSiBEA Zeolite in the Selective Catalytic Reduction of NO: Insight into the Reaction Mechanism", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
32. M.Elżbieciak, M.Kolasińska, S.Zapotoczny, R.Krastev, P.Warszyński "Non-Monotonic Growth of Multilayers Formed by Weak Polyelectrolytes" 7th Int. Symp. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008
33. M.Elżbieciak, S.Zapotoczny, P.Nowak, R.Krastev, M.Nowakowska, P.Warszyński "pH-Driven Non-Monotonic Growth of Polyelectrolyte Multilayers", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008

34. M.Filek, E.Rudolphi-Skórska, M.Zembala "Wpływ kadmu i selenu na własności powierzchniowe błon plastydów pszenicy w warunkach *in vitro*", 8. Ogólnopolska Konf. "Kultury *in vitro* w fizjologii roślin", Kraków 2008
35. U.Filek, A.Bressel, B.Sulikowski, M.Hunger "Structural Stability and Brønsted Activity of $H_3PW_{12}O_{40}$ and Its Aluminium Salt $AlPW_{12}O_{40}$ upon Heating", 41st Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków 2008
36. U.Filek, B.Sulikowski, A.Bressel, M.Hunger "Oxidation of Norbornene over Salts of Heteropolyacids", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
37. M.Gabrovska, D.Mucha, J.Krstić, R.Endreva-Kardijeva, D.Jvanović, M.Zimowska "Reduction of Ag-NiMg/SiO₂ Catalyst Precursors for Vegetable Oil Hydrogenation: *in situ* XRD Study", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
38. B.Gaweł, W.Łasocha. A.Olech "New Indexing Procedure for Crystal Contact with Large Differences in Lattice Parameters Length", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
39. J.Goclon, R.Gryboś, M.Witko "Stability of the Low-Index V₂O₅ Surfaces. Periodic DFT Approach", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
40. J.Goclon, R.Gryboś, M.Witko "Oxygen Vacancy Formation on Low-Index V₂O₅ Surfaces. Periodic DFT Approach", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
41. J.Goclon, R.Gryboś, M.Witko "Reduce (010), (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Periodic DFT Studies", Book of Abstracts. Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
42. S.Gojković, A.Kowal, K.-S.Lee, Y.-E.Sung "Electrochemical Oxidation of Ethanol on Pt-Rh-SnO₂/XC-72 Nanocatalyst", 59th Annual Meeting of ISE, (S.Thiery, Ed.), Sevilla 2008
43. H.J.Gotsis, M.Witko "Adsorption of Vanadium Atoms on Different Silica Surfaces: DFT Periodic Studies", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
44. Ch.U.Grosse, G.Pascale, S.Simon, M.Krüger, A.Troi, C.Colla, V.Rajčić, M.Łukomski "Smart Monitoring of Historic Structures - Overview about a Medium-Scale Research Project in the EU 7th Research Framework Programme", Int. Workshop SMW08 "In situ Monitoring of Monumental Surfaces", Firenze 2008
45. R.Gryboś, J.Hafner, L.Benco "NO Adsorption on Palladium Clusters in Modrenite", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
46. R.Gryboś, J.Hafner, L.Benco "NO Adsorption on Palladium Clusters in Mordenite", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
47. M.Grzywa, W.Łasocha "Chemical and Physical Investigations of Peroxo Compounds of Mo(VI) and W(VI)", 10. Frühjahrssymposium 2008, Rostock 2008

48. M.Grzywa, W.Łasocha "Powder Diffraction Studies of 1,2- and 1,3-Diaminopropane Octamolybdates", 11th European Powder Diffraction Conference EPDIC-11, Warsaw 2008
49. J.Haber, M.Nattich, T.Machej "Alkali-Metal Promoted Rhodium-on-Alumina Catalysts for Nitrous Oxide Decomposition", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
50. P.Hejduk, M.Szaleniec, M.Witko "DFT Study on the Ammonia Activation at the Low-Indices V₂O₅ Surfaces in the SRC on NO_x", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
51. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption and Dissociation at Unsaturated (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Studies", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
52. P.Hejduk, M.Witko "DFT Study on the Activation at the Low-Indices V₂O₅ Surfaces in the SCR on NO_x", in Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
53. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption at (010), (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Study", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
54. P.Hejduk, M.Witko "Ammonia Activation at Low-Indices V₂O₅ Surfaces in the SCR of NO_x. DFT Cluster Study", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
55. P.Hejduk, M.Witko "Water Adsorption and Dissociation at Low-Indices (010), (001) and (100) V₂O₅ Surfaces. Cluster DFT Studies", 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, Varna 2008
56. B.Jachimska, K.Onik, Z.Adamczyk "Behaviour of Hyperbranched Polyethylene Imine: Polyelectrolyte Structure to Design Surface for Control Protein Adsorption", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
57. B.Jachimska, K.Pamin, J.Połtowicz "Chitosan jako biodegradowalny nośnik makrocyklicznych kompleksów katalitycznych", 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008
58. B.Jachimska, K.Pamin, J.Połtowicz, K.Onik, R.Grabowski "Employment of Macrocyclic Metallocomplexes of Transition Metal Ions in Self-Assembling Systems for Catalytic Oxidation of Hydrocarbons", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
59. T.Jasiński, B.Jachimska, Z.Adamczyk, P.Warszyński "Conformation of Polyelectrolytes in Solution; Molecular Dynamics Modelling v.s. Viscosity and Electrophoretic Mobility Measurements", 7th Int. Symp on Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008
60. T.Jasiński, B.Jachimska, P.Warszyński, Z.Adamczyk "Conformations and Effective Charge of Low Molecular Weight Polyelectrolytes in Solution", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008

61. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Oxidation of Cyclooctane in Presence of Transition Metal Substituted Lacunary Keggin Anions", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
62. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Utlenianie fenolu w fazie ciekłej w obecności tetraalkiloamoniowych soli lakunarnych anionów Keggina", 51. Zjazd PTChem i SITPChem, Opole 2008
63. T.Kasza, A.Bielański "Reduced Silver Salt of Wells-Dawson Heteropolyacid as the Bi-Functional Catalyst", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008]
64. A.Klisińska-Kopacz, R.Grabowski, K.Samson, I.Gressel, B.Grzybowska-Świerkosz "Oxidative Dehydrogenation of Propane on VO_x/SiO₂ and VO_x/MgO Catalysts, Pure and with Potassium Additive: Catalysis and Kinetics", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
65. A.Klisińska-Kopacz, R.Tišlova, G.Adamski, R.Kozłowski "Control of Porosity Structure to Produce Roman Cement Mortars Compatible with the Historic Substrate", 11th Int. Congr. on Deterioration and Conservation of Stone, Toruń 2008
66. A.Kowal "Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO₂ and Pt-Rh-SnO₂ Electrocatalysts for Etanol Oxidation", 2nd IDECAT Conf. on Catalysis, Porquerolles 2008
67. A.Kowal, V.Jovanović, D.Tripković, A.Tripković, M.Mosiałek, G.Mordarski "Polished and Oxidized Glassy Carbon as a Support for Pt Electrodeposited Electrode for Oxidation of Formic Acid", Conf. CarboCat-III, Berlin 2008
68. A.Kowal, V.Komnenić, R.Zejnilović, K.Delijić "Synthesis of Au and Au-Pt Catalyst for Alcohol Oxidation", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
69. A.Kowal, U.Lačnjevac, E.Gębarowski, R.Kozioł "AFM and SEM Studies of the Composite Polymers TopogRAPHY", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
70. A.Kowal, M.Pavlović, M.Gruszczynski "AFM Studies of Corrosion Process of SnO₂ Anodes Used for Oxidative Treatment of Waste Waters", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
71. A.Kowal, J.Zhang, M.Shao, R.Adzic "New Catalyst for Electrochemical Oxidation of Ethanol: Pt/Rh/SnO₂", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
72. A.Król, A.Waksmundzka-Góra, Z.Zięba, J.W.Sobczak, A.Drelinkiewicz "Polyaniline and Poly(4-vinylpyridine) Supported Pd, Pt Catalysts. Role of Polymer in Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008

73. M.Krzan, K.Małyś "Influence of t Cationic Surfactants Adsorption on Local and Terminal Velocities of Bubbles", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
74. I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon, K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, P.Warszyński "Development of a Photo-Catalytic Membrane Reactor – the Interaction of a Membrane Support Material and the Photo-Catalyst", 10th Int. Conf. on Inorganic Membranes (ICIM), Tokyo 2008
75. Ł.Lasyk, M.Łukomski, Ł.Bratasz "Simple Electronic Speckle Pattern Interferometer (ESPI) for the Investigation of Wooden Art Objects", COST IE0601 Workshop, Braga 2008
76. W.Łasocha, M.Grzywa "Moybdates – Sythesis and Crystal Structure of New Catalytic Materials", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
77. K.Łątka, J.Gurgul, A.W.Pacyna, Y.Verbovytsky, J.Przewoźnik, R.Pöttgen "Bulk and Local Properties of DyRhSn", 16th Int. Conf. on Solid Compounds of Transition Elements, Dresden 2008
78. T.Machej, L.Matachowski, D.Mucha, J.Gurgul, R.P.Socha, Z.Olejniczak "Unique Structure of Ag₃PW₁₂O₄₀ Salt – the Influence of Temperature and Hydrogen Treatment", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
79. J.Matusik, A.Gaweł, E.Bieleńska "Aluminosilicate Nanotubes Derived from Kaolinite Group Minerals", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
80. A.Micek-Ilnicka "Solid Heteropolyacids as Supramolecular Catalysts. Case Study: Tertiary Ethers Synthesis", Conf. on Supramolecular Approaches to Catalysis, Barcelona 2008
81. A.Micek-Ilnicka, A.Bieleński "Solid Heteropolyacids as Supramolecular Catalysts: Tertiary Ethers (MTBE, ETBE) Formation", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
82. A.Micek-Ilnicka, A.Lubańska "Hydrated and Dehydrated Well-Dawson and Keggin Type Heteropolyacids in ETBE Synthesis: a Comparative Study", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
83. A.Michalik-Zym, M.Zimowska, E.Bieleńska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Layered Sodium Disilicates as Precursors of Mesoporous Silicas: Hydration of (δ -Na₂Si₂O₅ and (σ -Na₂Si₂O₅", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
84. A.Michalik-Zym, M.Zimowska, E.Bieleńska, K.Bahranowski, E.M.Serwicka "Layered Sodium Disilicates as Precursors of Mesoporous Silicas: Hydration of δ -Na₂Si₂O₅ and α -Na₂Si₂O₅", ", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
85. Ł.Mokrzycki, Z.Olejniczak, B.Sulikowski "Desilication of ZSM-5, ZSM-12 and MCM-22 Type Zeolites and Their Performance in Isomerization of α -Pinene", 41st Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków 2008

86. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Properties of Desilicated ZSM-5, Zsm12, MCM-22 Materials and Zeolite/McM-41 Derivatives in Isomerization of α -Pinene", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
87. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Desilication of ZSM-12 and MCM-22 Type Zeolites and Their Performance in Isomerization of α -Pinene", 4th Federation of European Zeolite Associations Conf., Paris 2008
88. Ł.Mokrzycki, B.Sulikowski "Desilication and/or Hydrothermal Conditions for ZSM-12 Modification and a ZSM-12/MCM-41 Composite Synthesis: Catalytic Activity in Isomerization of α -Pinene", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008
89. D.Mucha, E.Nosek, R.Kozłowski "Examination of Corrosion Products on the Royal Sarcophagi in the Wawel Cathedral in Krakow", Workshop X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage, EPDIC-11, Kraków 2008
90. D.Nikolova, R.Edreva-Kardijeva, G.Tyuliev, H.Kolev, E.M.Serwicka, R.Dula, T.Grozeva "XPS and EPR Study of (K₂O)(NiO)WO₃/ γ -Al₂O₃ System Catalysts for Water-Gas Shift Reaction with Sulfur Presence in the Feed", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
91. D.Nikolova, T.Grozeva, R.Edreva-Kadjieva, E.M.Serwicka "Promoted Sulfur-Resistant Re/ γ -Al₂O₃ Systems as Water-Gas Shift Reaction Catalysts: Synergism in Catalytic Performance", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
92. K.Noga, P.P.Romańczyk, A.J.Włodarczyk, E.Broclawik "Theoretical Modeling of Electrochemical Interactions in Bimetallic Molybdenum Nitrosyl Complexes Incorporating Unsaturated Bridges", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
93. K.Noga, P.P.Romańczyk, A.J.Włodarczyk, E.Broclawik "DFT Modeling of Metal-Metal Electronic Interactions in Molybdenum Nitrosyl Complexes with Saturated Bridges", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
94. P.Nowak, P.Żurek, R.P.Socha, M.Ruszel, J.Haber "Preparation of TiO₂ for Photocatalytic Applications – Doping of TiO₂/Ti with Transition Metal Ions", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
95. A.Pacuła, R.Mokaya "Porous Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition Using As-Synthesised Zeolites as Template: Synthesis and Hydrogen Storage Properties", in: "Nanoporous Materials", Nanoporous Materials-V, Vancouver, 2008 (plakat)
96. A.Pacuła, R.Mokaya, L.Kępiński "Characterization of Highly Porous Carbon Materials Prepared via Chemical Vapour Deposition (CVD) Method", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
97. A.Pacuła, R.Mokaya, B.Rajchel, L.Kępiński "Characterisation of Physicochemical Properties of N-Doped Carbon Materials Prepared via Chemical Vapour Deposition", Conf. CarboCat-III, Berlin 2008

98. A.Pacuła, P.Nowak, R.Mokaya, E.Bielańska "Application of Carbon Materials as Supports for Transition Metals in Electrocatalysis", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
99. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, R.Mokaya "Examination of Carbon Materials as Hydrogen Storage Media and as Support in Electrocatalysis, Conf. CarboCat-III, Berlin 2008
100. H.Pálková, J.Madejová, J.Podobiński, J.Kryściak-Czerwenka, E.M.Serwicka Acid Sites Developed on Aluminated PCH Derived from Laponite", ", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
101. K.Pamin, B.Jachimska, K.Onik, J.Połtowicz, R.Grabowski "Electrostatic Self-Assembly of Polyoxometalates on Chitosan as Catalysts of Oxidation of Cyclic Hydrocarbons", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
102. K.Pamin, J.Połtowicz ""Aerobic Epoxidation of Propylene Catalyzed by Polyoxometalates", 16th Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Firenze 2008
103. K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber "Keggin-Type Polyoxometalate Complexes as Catalysts of Propylene Epoxidation", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
104. T.Pańczyk, T.P.Warzocho, P.Szabelski, W.Rudziński "Kinetic Adsorption Energy Distributions of Geometrically Irregular Surfaces. A Molecular Dynamics Study", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
105. G.Para, J.Węgrzyńska, K.Wilk, P.Warszyński "Quantitative Description of Dimeric Cationic Surfactants Adsorption", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
106. V.Pashkova, K.Góra-Marek, P.Sarv, M.Derewiński "Formation and Nature of Active Aites in the FAU- and BEA-Composites", 4th Federation of European Zeolite Associations Conf., Paris 2008
107. V.Pashkova, W.Pudło, A.Jarzębski, M.Derewiński "Composite Materials Containing Zeolite Layers Deposited on the Pre-Shaped Silica and Silica/Alumina Porous Monoliths", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
108. V.Pashkova, W.Pudło, A.Jarzębski, M.Derewiński "Composite Materials Containing Zeolitic Layers Deposited on the Silica/Alumina Porous Monoliths", 4th Federation of European Zeolite Associations Conf., Paris 2008
109. V.Pashkova, E.Włoch, E.Bielańska, M.Derewiński "Preparation of Composite Materials Containing a Zeolite Phase Dispersed in the Porous Silica Monoliths", 9th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Štrbské Pleso 2008
110. V.Pashkova, E.Włoch, A.Mikołajczak, M.Łaniecki, B.Sulikowski, M.Derewiński "Composite Materials Prepared by Partial Recrystallization of Amorphous Walls of Mesoporous Material SBA-15-Type into MFI-Type Mesoporous Domains", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008

111. W.Piasecki "Modelling of the Relaxation Time of Proton Adsorption from Solution onto Metal Oxides: Classical and New Theoretical Approach", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
112. J.Plona, D.Mucha, B.Napruszewska, J.Podobiński, M.Śliwa, R.Grabowski, E.M.Serwicka "Layered Double Hydroxide-Derived Cu-Zn-Al-Zr-O Mixed Oxide Catalysts for CO₂ Utilization", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
113. J.Plona, D.Mucha, B.Napruszewska, J.Podobiński, M.Śliwa, R.Grabowski, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-Derived Cu-Zn-Al-Zr Mixed Oxide Catalysts for CO₂ to Methanol Conversion", ", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
114. W.Płaziński, W.Rudziński, " Biosorption in Environmental Protection: Analysis of Experimental Data Using the Non-Competitive Adsorption Model", 6th Int. Symp. on Chromatography of Natural Products", Lublin 2008
115. J.Połtowicz, E.Bielańska, E.M.Serwicka, R.Mokaya, Y.Xia "Aluminated SBA-15 as Supports for Mn(TMPyP) Porphyrin: the Role of Support Texture in Determining the Catalytic Performance in Cyclohexene Oxidation", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
116. J.Połtowicz, B.Jachimska, K.Pamin, K.Onik, R.Grabowski "Application of Self-Assembling System in Catalytic Oxidation", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
117. J.Połtowicz, K.Pamin, W.Bukowski, J.Noworól, J.Haber "Catalytic Activity of Schiff Base Complexes in Olefin Epoxidation", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
118. J.Połtowicz, K.Pamin, P.Staszewski, J.Haber, J.Noworól, W.Bukowski "Hydroxylation of Phenol by H₂O₂ – Influence of Salen Structure on Reaction Selectivity", 16th Int. Symp. on Homogeneous Catalysis, Firenze 2008
119. W.Pudło, V.Pashkova, M.Derewiński, A.B.Jarzębski "Silica-Alumina Composite Monoliths with a Hierarchical Pore Structure Containing the MFI-Type Zeolite Films", Nanotechnology Conf. and Trade Show NSTI Nanotech, Boston 2008
120. M.Radoń, E.Brocławik, K.Pierloot "Binding of CO, NO and O₂ to Heme by DFT and CASPT2 Calculations", Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Hejnice 2008
121. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzywa, J.Czop, W.Łasocha "Powder Diffraction in Investigations of the Object of Cultural Heritage:", 50th Polish Crystallographic Meeting, Wrocław 2008
122. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzywa, J.Czop, W.Łasocha "Powder Diffractometry in the Investigations of Cultural Heritage Artefacts", Workshop X-Ray Techniques in the Investigations of the Objects of Cultural Heritage, EPDIC-11, Kraków 2008
123. P.Rejmak, M.Radoń, E.Brocławik "Theoretical Studies on Dinitrosyl Species in Cu(I) Exchanged Zeolites", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008

124. P.Rejmak, M.Radoń, E.Broclawik "Theoretical Studies on Dinitrosyl Species in Cu(I) Exchanged Zeolites", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
125. W.Rudziński, W.Płaziński "Kinetics of Solute Adsorption at Solid/Solution Interfaces: a Theoretical Description Based on the Statistical Rate Theory", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
126. A.Sierczyńska, M.Kopczyk, E.Bielańska, A.Kowal "Synthesis and Properties of Pt and Pt-Ru Nanocatalyst for Methanol Oxidation", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
127. R.P.Socha, N.Spiridis, E.Zackiewicz, J.Korecki "XPS and STM Studies of Gold Nanostructures on Iron-and-Oxygen-Rich Fe₃O₄(001) Surfaces", 25th European Conf. on Surface Science ECOSS 25, Liverpool 2008
128. N.Spiridis, K.Freindl, W.Karaś, K.Matlak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Zajac, J. Korecki "Surface Electronic Properties of Fe(001) Probed via Hyperfine Interactions", 25th European Conf. on Surface Science ECOSS 25, Liverpool 2008
129. M.Strycharczyk, H.Pálková, M.Zimowska, E.M.Serwicka, K.Bahranowski, Z.Olejniczak "Montmorillonite-Derived Porous Clay Heterostructures (PCHs): a Study of Structure Evolution", ", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
130. J.Superata, I.Janowska, E.Bielańska, P.Warszyński "Hydrogen Peroxide Sensing Structures Built with Supra/Molecular Self-Assembly Techniques", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
131. J.Superata, I.Janowska, C.Pham-Huu, P.Warszyński "Carbon-Based Nanostructured Hybrid Composite Layers for Hydrogen Peroxide Chemical Sensing", European Materials Research Society E-MRS 2008 Spring Meeting, Strasbourg 2008
132. J.Superata, P.Warszyński "Miniaturization of Electrochemical Cells for Effective Testing of Hydrogen Peroxide Microsensor Electrodes", 19th Int. Symp. on Pharmaceutical and Biomedical Analysis PBA 2008, Gdańsk 2008
133. J.Superata, P.Warszyński "Nanostrukturyzowane warstwy kompozytowe w mikrosensorach nadtlenu wodoru", 2. Krajowa Konferencja Nanotechnologii - Nano2008, Kraków 2008
134. J.Superata, P.Warszyński "Electrocatalytic Nanoparticle/Polyelectrolyte Hybrid Multilayers for Chemical Sensing", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
135. M.Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "Quantum Chemical Modelling of Oxidation of Ethylbenzene by Ethylbenzene Dehydrogenase", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008

136. M.Szaleniec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Porphyrin-based Catalysts – Quantum Chemical Study", 12th Int. Conf. on Theoretical Aspects of Catalysis ICTAC-12, Varna 2008
137. M.Szaleniec, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Porphyrin-Based Catalysts – Structure Property Relationship", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
138. K.Szczepanowicz, D.Dronka-Góra, G.Para, A.M.Bouzga, C.Simon, P.Warszyński "Chloroform Emulsions Containing TEOS, APS and DTSACL as Cores for Microencapsulation", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
139. K.Szczepanowicz, D.Dronka-Góra, G.Para, P.Warszyński "Encapsulation of Liquid Cores by Layer-by-Layer Adsorption of Polyelectrolytes", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
140. K.Szczepanowicz, D.Wodka, P.Nowak, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon "Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment – Preparations and Testing of the Photocatalyst", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
141. K.Szczepanowicz, D.Wodka, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński, I.Kumakiri, J.Yang, Ch.Simon "Preparation of TiO₂/Silver Nano-Particles Composites for Photo-Catalytic Applications in the Removal of Organic Matter from Water", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
142. L.Szyk-Warszyńska, E.Jarek, P.Warszyński "Adsorption of α - and β -Casein at Free Interface and in Polyelectrolyte Multilayer Structures", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
143. M.Ślęzak, T.Ślęzak, S.Stankov, M.Zajac, K.Matlak, N.Spiridis, B.Laenens, N.Planckaert, M.Rennhofer, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, R.Ruffer, J.Korecki "Depth-Resolved Magnetization Structure at the Spin Reorientation Transition in Fe/W(100) Ultra-Thin Films", Workshop on High Temporal and Spatial Resolution Studies of Magnetic Nanostructures, Augustów 2008
144. M.Śliwa, R.Grabowski, J.Plona, J.Mizera, E.M.Serwicka "Direct Synthesis of Dimethyl Ether from the Syngas over Bifunctional Catalysts", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
145. R.Todorov, J.Zawała, K.Małyśa, D.Exerowa "Influence of pH and BSA Solutions on Bubble Motion and Stability of the Foam Films Formed", Conf. "Nanoscale Phenomena and Structures", Sofia 2008
146. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "Theoretical Description of Properties of Active Sites at the (011)Mo₂ Surface", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008

147. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "Description of Active Sites Present at the (011)MoO₂ Surface. Periodic and Cluster DFT Quantum Chemical Studies", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
148. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Oxygen Activation at Molybdenum Hetero- and Homo-Catalysts. DFT Cluster Model Studies", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V Kraków 2008
149. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Oxygen Activation at Molybdenum Hetero- and Homo-Catalysts. DFT Cluster Model Studies", Conf. Current Trends in Theoretical Chemistry V, Kraków 2008
150. R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "The Influence of Metal Coordination on Formation and Electronic Properties of Oxo Species. DFT Cluster Model Study", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
151. A.Tripković, K.Popović, R.Stefanović, A.Kowal "Electrochemical Oxidation of Formic Acid on PtBi Alloy", 1st Regional Symp. on Electrochemistry RSE-SEE, Rovinj 2008
152. A.Trybała, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "The Effect of Anchoring PEI Layer on the Build-Up of Polyelectrolyte Multilayers Films", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
153. A.Trybała, L.Szyk-Warszyńska, P.Warszyński "Formation of Polyelectrolyte Multilayer Films at Heterogeneous Surfaces", 7th Int. Symp. Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008
154. W.Turek, A.Śniechota, J.Haber "Dehydrogenation of Cyclohexane as a Measure of Redox Properties of Oxide Catalysts", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
155. M.Wasilewska, B.Jachimska, Z.Adamczyk "Bulk Characteristic of Globular Proteins by Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility and Dynamic Viscosity Measurements", 7th Int. Symp on Polyelectrolytes 2008, Coimbra 2008
156. M.Wasilewska, B.Jachimska, Z.Adamczyk "Bulk Characteristic of Globular Proteins by Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility and Dynamic Viscosity Measurements", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
157. D.Wilgocka-Ślęzak, T.Ślęzak, N.Spiridis, K.Freindl, M.Zajac, M.Ślęzak, K.Matlak, J.Korecki "The Thickness-Induced Polar Spin Reorientation Transition in Ultra-Thin Fe(001) Films on Au(001)V, 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008
158. M.Witko, P.Hejduk, J. Goclon "The Role of V₂O₅ Low-Indices Surfaces in Catalytic Processes. Cluster DFT Studies", 14th Int. Congr. on Catalysis, Seoul 2008
159. D.Wodka, A.Michalska, A.Struska, R.P.Socha, P.Nowak "Preparation of Ti₂ for Photocatalytic Applications – Transition-Metal Doped TiO₂ Gels", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008

160. D.Wodka, A.Pacuła, P.Nowak "Oxygen Reduction Catalysis by Supported Transition Metal Compounds", Faraday Discussion 140: Electrocatalysis – Theory and Experiment at the Interface, Southampton 2008
161. S.Wybraniec, P.Stalica, T.Michałowski, K.Mitka, P.Kowalski, M.Szaleniec "Inversion of Elution Order of Diastereomers in Methyl Esters of Betacyanins and Decarboxylated Betacyanins Analysed in RP-HPLC", 27th Int. Symp. on Chromatography, Münster 2008
162. S.Wybraniec, P.Stalica, A.Spórna, M.Szaleniec, G.Jerzy, T.Michałowski "Zastosowanie technik chromatograficznych w analityce pochodnych betainy", 3. Konf. Analityczne Zastosowania Chromatografii Cieczowej, Warszawa 2008
163. S.Wybraniec, P.Stalica, M.Szaleniec, G.Jerzy "Chromatograficzne badania betacyjanin w owocach Chenopodium foliosum techniką LC-ESI-MS", 3. Konf. Analityczne Zastosowania Chromatografii Cieczowej, Warszawa 2008
164. S.Wybraniec, P.Stalica, M.Szaleniec, G.Jerzy "Identyfikacja betalain Chenopodium quinoa techniką LC-ESI-MS", 3. Konf. Analityczne Zastosowania Chromatografii Cieczowej, Warszawa 2008
165. E.Zackiewicz, R.P.Socha, N.Spiridis, J.Korecki "STM and XPS Studies of Gold Nanostructures on Iron and Oxygen Rich Fe₃O₄(001) Surfaces", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
166. M.Zajac, T.Ślęzak, M.Ślęzak, N.Spiridis, K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, K.Matlak, E.Zackiewicz J. Korecki "Oxygen Adsorption on Fe(110)", 14th Int. Conf. on Solid Films and Surfaces, Dublin 2008
167. J.Załuca, P.Kozyra, M.Mitoraj, E.Broclawik, J.Datka "Cu⁺, Ag⁺ and Na⁺ Cationic Sites in ZSM-5 Interacting with Benzene: DFT Modelling and IR Studies", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
168. J.Zawała, D.Kowalczyk, R.Świetlik, K.Małyś "Surfactants in Local Water Reservoirs and the Bubble Velocity as the Method for Detection the Contamination Degree", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
169. J.Zawała, A.Niecikowska, R.Miller, K.Małyś "Influence of the Bubble Motion in Cationic Surfactant Solutions on Time of the Three Phase Contact Formation at Mica Surface", 17th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS 2008, Berlin 2008
170. J.Zawała, R.Todorov, A.Olszwska, D.Exerova K.Małyś "Influence of pH on the BSA Ability to Affect the Bubble Rising Velocity and Stability of Foam and Wetting Films", 22nd Conf. European Colloid and Interface Society & COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków 2008
171. V.Zazhigalov, D.Brazhyk, Y.Zaitsev, A.Kowal, K.Wieczorek-Ciurowa "Nano-Dispersed Carbon Supported MeO_x/C Catalysts for Environmental Protection", Conf. CarboCat-III, Berlin 2008

172. A.Zięba, T.Kasza, A.Bielański A.Drelinkiewicz "An Introductory Study of Bio-Fuel Synthesis in Treansestrification of Natural Iols. The Choice of Catalysts", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008
173. A.Zięba, T.Kasza, L.Matachowski, A.Pacuła, A.Bielański, E.Serwicka-Bahranowska, A.Drelinkiewicz "Bio-Fuel Synthesis in Transestrification of cCastor Oil Using Heteropolyacid-Based Solid Catalysts", 5th Int. Conf. on Enviromental Catalysis, Belfast 2008
174. M.Zimowska, M.Bazarnik, J.Bazarnik, K.Bahranowski "Modification of FSM-16 Mesoporous Materials Structure – Preliminary Results", ", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
175. M.Zimowska, R.Dula, J.Plona, B.Napruszewska, R.Janik, T.Machej, E.M.Serwicka "Synthesis, Physicochemical Characterization and Catalytic Properties of Hydrotalcite-Like Cu-Mn-Al Compounds", ", 4th Mid-European Clay Conference, Zakopane 2008
176. M.Zimowska, J.Morgiel, Z.Czuła "Synthesis od Hierarchical Mesoporous SBA-15 Material by Incorporation of Carbon Black Nanoparticles", Catalysis for Society, 40th Annual Polish Conf. on Catalysis, Kraków 2008

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. Z.Adamczyk "Nanostructured Organic Materials: Nano and Bioparticles at Surfaces", Wydział Chemii, Uniwersytet w Wilnie, 2008
2. A.Bielański, wystąpienie w debacie na zaproszenie, konferencja "Marzec 1968 – pamięć i przemilczenia" IPN Oddział w Krakowie, Kraków 2008
3. E.Broclawik "Theoretical Modeling of Metal Active Sites in Mesoporous Materials", Tohoku University, Sendai 2008
4. E.Broclawik, T.Borowski, M.Radoń "Electronic and Steric Factors in Transition Metal Complexes and Smart Active Sites: Challenges for Quantum Chemistry", Lund University, 2008
5. K.Freindl, M.Zajac, M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Matlak, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, W.Karaś, J.Korecki "Adsorpcja tlenu na powierzchni Fe(110)", Katedra Fizyki Ciała Stałego AGH, Kraków 2008
6. J.Haber "The Role of Catalysis in Determining Men's Quality of Life", Polskie Stowarzyszenie Wodoru i Ogniw Paliwowych, Kraków 2008
7. J.Korecki "Druga młodość efektu Mössbauera: fonony w nanostrukturach", Uniwersytet Adama Mickiewicza, Poznań 2008
8. J.Korecki "Nanostruktury epitaksjalne, Wydziału Inżynierii Materiałowej, Politechnika Warszawska, 2008

9. J. Korecki "Depth-Resolved Local Magnetization Structure at Surface Studied with Nuclear Spectroscopies", National Centre on nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S3), CNR-INFN, Modena 2008
10. A.Kowal "Nanotechnology for Modern Fuel Cells: Synthesis and Properties of Oxide-Modified Pt and Pt-Rh Nanocatalysts for Ethanol Oxidation", University of Poitiers, 2008
11. A.Kowal "Electrochemical Oxidation of Ethanol on Pt/Rh/SnO₂ Electrode", IHTM Institute of Electrochemistry, Belgrade University, 2008
12. A.Kowal "Nanotechnology for Modern Fuel Cells: Synthesis and Properties of Oxide-modified Pt and Pt-Rh Nanocatalysts for Ethanol Oxidation", Instytut Metali Nieżelaznych, Oddział w Poznaniu, CLAiO, Poznań 2008
13. A.Kowal "Introduction to STM and AFM", Ruder Boskovic Institute, Zagreb 2008
14. M.Łukomski "Interferometria plamkowa w badaniach wpływu fluktuacji mikroklimatycznych na obiekty historyczne", Zakład Optyki Atomowej i Fotoniki, Instytut Fizyki UJ, Kraków 2008
15. K.Małyś, J.Zawała "Kolizje pęcherzyków z różnymi powierzchniami i parametry decydujące o utworzeniu kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe", Instytut Metali Nieżelaznych, Gliwice 2008
16. K.Małyś "Dynamika powstawania i przerywania filmów ciekłych podczas kolizji pęcherzyka z różnymi powierzchniami międzyfazowymi", Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa 2008
17. D.Rutkowska-Żbik "Why am I interested in tetrapyrrolic complexes?", London Centre for Nanotechnology, University College London, 2008
18. P.Warszyński "Filmy polielektrolitowe jako wielofunkcyjne materiały dla nanotechnologii", Polskie Towarzystwo Chemiczne, Kraków 2008
19. M.Witko "Chemia kwantowa jako narzędzie opisu powierzchni katalizatorów", Wydział Inżynierii Materiałowej Politechniki Warszawskiej, 2008

WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. T.Borowski, ćwiczenia "Chemia Kwantowa Makrocząsteczek" dla III roku biofizyki UJ (30 godz.)
2. Ł.Bratasz, wykład "Nowoczesne techniki analityczne dla konserwacji obiektów zabytkowych", Studium Podyplomowe Wydziału Chemii UJ (4 godz.)
3. E.Brocławik, koordynacja wykładu z chemii fizycznej dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, przygotowanie oraz prowadzenie działu "Struktura, spektroskopia i oddziaływanie" (14 godz.)
4. E.Brocławik, wykład monograficzny "Modelowanie Molekularne Materiałów" dla panelu „nowe materiały i kataliza”, Wydział Chemii UJ (30 godz.)

5. E.Broclawik, wykład kursowy "Chemia Kwantowa Makrocząsteczek" dla kierunku biofizyka, Instytut Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ (30 godz.)
6. E.Broclawik, wykład monograficzny "Stosowana Chemia Kwantowa" dla doktorantów Środowiskowego Studium Doktoranckiego przy Wydziale Chemii UJ (30 godz.)
7. M. Derewiński, wykłady "Wstęp do spektroskopii w podczerwieni i Ramana" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
8. A.Drelinkiewicz, wykład "Termodynamika" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (18 godz.)
9. J.Gurgul, wykłady "Auger Electron Spectroscopy (AES)" i "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis (ESCA)" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
10. B.Jachimska, Metoda Dynamicznego Rozpraszania Światła (DLS): pomiary wielkości cząstek koloidalnych - wykłady w ramach przedmiotu specjalistycznego "Metody Analizy Instrumentalnej" dla 4 roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (2godz.)
11. B.Jachimska, Laser Doppler Velocimetry: pomiary ruchliwości elektroforetycznej cząstek koloidalnych - wykłady w ramach przedmiotu specjalistycznego "Metody Analizy Instrumentalnej" dla 4 roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (2 godz.)
12. J.Korecki, pensum dydaktyczne AGH
13. J.Korecki, wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN
14. A.Kowal, Seminarium dotyczące technik AFM i STM, University of Eastern Sarajevo, Department of Technology, Zvornik (10 godz.)
15. A.Kowal, Seminarium i zajęcia praktyczne dotyczące technik AFM i STM z wykorzystaniem mikroskopu Nanoscope DI, IHTM Institute of Electrochemistry, Belgrade University (36 godz.)
16. R.Kozłowski, wykład "Nowoczesne techniki analityczne dla konserwacji obiektów zabytkowych", Studium Podyplomowe Wydziału Chemii UJ (4 godz.)
17. R.Kozłowski, wykład dla słuchaczy Studiów Podyplomowych Zabytkoznawstwa i Konserwatorstwa Dziedzictwa Architektonicznego, Instytutu Zabytkoznawstwa i Konserwatorstwa Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu (4 godz.)
18. W.Łasocha, wykład i egzamin z zakresu chemii fizycznej "Dyfrakcja rentgenowska" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
19. W.Łasocha, wykład "Fizykochemia ciała stałego i metody badań" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
20. P.Nowak, "Metody elektrochemiczne", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)

21. E.M.Serwicka, wykład "Zastosowanie EPR do badania minerałów ilastych", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
22. B.Sulikowski, cykl wykładów i egzamin z fizykochemii ciała stałego dla studentów IV roku studiów stacjonarnych, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej (15 godz.)
23. B.Sulikowski, koordynacja wykładów "Współczesne zagadnienia i metody fizykochemii" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN
24. B.Sulikowski, wykład "Spektroskopia Magnetycznego Rezonansu Jądrowego" dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
25. P.Warszyński, Chemia Fizyczna – wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (14 godz.)

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. M.Hunger "(Universität Stuttgart) "Solid-State NMR Characterization of Brønsted Acid Sites in Solid Catalysts"
2. J.A.Kłoczowski OP "Autorytet sumienia. Rzecz o Freudzie i Tomaszu z Akwinu" wykład bożonarodzeniowy
3. J.Madejova ((Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Bratislava) "Near Infrared Spectroscopy in Studies of Modified Smectites"
4. A.Malkin (Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Bratislava) "Theoretical Prediction and Interpretation of NMR and EPR Parameters"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. D.Duraczyńska "Materiały nanoporowate jako nanoreaktory katalityczne"
2. K.Freindl, D.Wilgocka-Ślęzak, R.Socha "Tlenkowe i metaliczne struktury na powierzchni: wytwarzanie struktura i dynamika, właściwości elektronowe, reaktywność"
3. P.Hejduk "" Adsorpcja atomów i cząsteczek na powierzchniach tlenków metali przejściowych"
4. E.Jarek "Adsorpcja jonowych surfaktantów na ciekłych powierzchniach"
5. A.Knera "Prawo zamówień publicznych"
6. A.Kowal "Synteza i właściwości nanokatalizatorów Pt, Pt-Rh modyfikowanych Sn)₂ (czy ogniwo paliwowe zasilane etanolem ma szanse realizacji?)"

7. P.Nowak "Problemy odnawialnych źródeł energii"
8. T.Pańczyk, T.Piasecki "Symulacje komputerowe kinetyki adsorpcji jonów wodorowych na granicy faz tlenek metalu/elektrolit"
9. T.Pańczyk, T.Piasecki "Opis teoretyczny kinetyki procesów sorpcji stosowanych w technologiach ochrony środowiska"
10. T.Pańczyk, T.Piasecki "Badanie wpływu struktury fraktalnej powierzchni na dynamikę transportu w układach gaz/ciało stałe"
11. M.Szaleniec "Badanie korelacji aktywność katalityczna a struktura katalizatora na przykładzie układów porfiryńowych"
12. A.Trybała "Elektroaktywne cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanostrukturami węglowymi"
13. P.Weroński "W kierunku sztucznego życia – projektowanie minimalnej samoreplikującej maszyny molekularnej"
14. J.Zawała "Wpływ kąta kolizji i szorstkości powierzchni na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego"
15. M.Zimowska "Spalanie zanieczyszczeń organicznych na katalizatorach otrzymanych z minerałów warstwowych"

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. A. Bielański "Krzem – pierwiastek, któremu zawdzięczamy Internet"
2. J.Korecki "Jak się przeświecić, to tylko w synchrotronie"
3. R.Kozłowski "Na ratunek arcydziełu z kraju samurajów"
4. P.Weroński "Mewtwo – marzenie czy rzeczywistość? O projektowaniu sztucznego życia"
5. P.Nowak "Jak ukraść energię Słońcu?"
6. J.Szeleniec, M.Szaleniec "Zrozumieć i stworzyć – jak projektujemy leki?"
7. J.Barbasz "Świat w nanoskali"
8. M.Łukomski "Obrazy mistrzów w zbliżeniu"
9. R.Gryboś "Kataliza w Kosmosie"
10. A.Pacuła "Różne wcielenia węgla i ich zastosowania"

WYKŁADY POPULARNO-NAUKOWE

1. A.Bielański "Woda, związek bardzo pospolity", Festiwal Nauki, Kraków 2008
2. A.Bielański "Prof. Adam Skąpski - od Krakowa do Lagos", Komisja Historii Nauki Polskiej Akademii Umiejętności, Kraków 2008

NADANE STOPNIE I TYTUŁY NAUKOWE

PROFESORA

1. Piotr Warszyński

DOKTORA HABILITOWANEGO

1. Jarosław Handzlik (Politechnika Krakowska) "Struktura i aktywność centrów molibdenowych na nośnikach – teoretyczne badania metatezy alkenów"
2. Jan Kornatowski (Max-Panck-Institut für Kohlenforschung , Mülheim) "Synteza i modyfikacja sit molekularnych typu AFI w formie dużych kryształów jako materiałów modelowych do badań właściwości fixzykochemicznych"
3. Tomasz Pańczyk "Analiza teoretyczna ewolucji czasowej układów adsorpcyjnych gaz/ciało stałe oparta na Statystycznej Teorii Transportu"
4. Paweł Weroński "Nieodwracalna adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchniach niejednorodnych"

DOKTORA

1. Jakub Goclon "Analiza termodynamiczna, właściwości elektronowe i relaksacja struktury różnych powierzchni V_2O_5 – obliczenia periodyczne" (promotor: prof. M.Witko)
2. Paweł Hejduk "Powierzchniowe centra aktywne w V_2O_5 – badania teoretyczne w przybliżeniu klasterowym" (promotor: prof. M.Witko)
3. Paweł Rejmak "Investigation of Cu(I) Sites in FAU and MFI Zeolites and Their Interactions with Small Molecules: Quantum Chemical and Hybrid QM/MM Studies" (promotor: prof. E.Brocławik)
4. Renata Tišlova (Pardubice University) "Hydratation of Natural Cements" (promotor: doc. R.Kozłowski)
5. Jan Zawala "Formation and rupture of liquid films formed at various interfaces by the colliding bubble" (promotor: prof. K.Małyssa)

KONFERENCJE I IMPREZY NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. 40th Annual Polish Conference on Catalysis 'Catalysis for Society', Kraków, May 11th-15th, 2008 (M.Witko)
2. Meeting of Professor Gerhard Ertl (2007 Nobel Prize Winner - Fritz Haber Institut der Max Planck Gesellschaft, Berlin) with Ph.D. students, students and high schools' pupils, Krakow, May 13th, 2008 (M.Witko)
3. Festiwal Nauki, Rynek Główny w Krakowie, 14-17 maja 2008 (P.Warszyński, M.Barańska)
4. 15. Forum Zeolitowe, Kocierz, 16-21 czerwca 2008 (M.Derewiński)
5. 22nd Conference of the European Colloid and Interference Society ECIS 2008, Kraków, August 31st-September 5th, 2008 (Z.Adamczyk)
6. COST D43 Workshop 'Colloid and Surface Science for Nanotechnology', Kraków, September 2nd-September 4th, 2008 (K.Małysa)
7. Workshop 'X-Ray Techniques in Investigations of the Object of Cultural Heritage' (in frames of 11th European Powder Diffraction Conference), Kraków, September 18th-19th, 2008 (R.Kozłowski, W.Łasocha)
8. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 14 listopada 2008 (M.Derewiński)

WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

Wypis 102

z protokołu z XI posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w dniu 19 lutego 2009 roku, dotyczący "Sprawozdania z działalności Instytutu w 2008 r."

7. Sprawozdanie z działalności Instytutu w 2008 r.

Przewodnicząca Rady Naukowej prof. M. Nowakowska poprosiła Zastępcę Dyrektora Instytutu ds. Naukowych, prof. E. Serwicką-Bahranowską, o przedstawienie sprawozdania z działalności Instytutu za 2008 r.

Na wstępie prof. E. Serwicka-Bahranowska omówiła sytuację finansową naszego Instytutu, przedstawiając bilans za 2008 rok. W pierwszym punkcie zaprezentowała dochody Instytutu. Podstawą dotacji Instytutu jest dotacja Ministerialna, która w roku 2008 wynosiła 5 682,0 tys. zł, czyli była o 5% niższa niż dotacja w 2007 roku. Znaczną kwotę, w wysokości ok. 1 mln zł, otrzymaliśmy na zakup aparatury specjalnej. Prof. E. Serwicka-Bahranowska zwróciła uwagę, że dotacja statutowa jest tylko jednym, chociaż bardzo ważnym sposobem finansowania w strukturze dochodów Instytutu. Inne źródła finansowania to: projekty badawcze krajowe i zagraniczne, współpraca naukowa i naukowo-techniczna z zagranicą, patenty, licencje, zlecenia, działalność operacyjna, operacje finansowe. Razem uzyskana kwota wynosiła w roku 2008 ok. 20,9 mln zł, (z czego dotacja statutowa stanowiła zaledwie ok. 27%), a łącznie z produkcją w toku 21,8 mln zł. Jeśli chodzi o wydatki, to na osobowy fundusz płac, łącznie z ZUS-em, jest wydawane ok. 99% dotacji statutowej. Z uwagi na posiadanie przez Instytut dużej ilości drogiej aparatury, rośnie równocześnie kwota związana z jej utrzymaniem. Wzrastająca ilość realizowanych grantów pociąga za sobą równoczesny wzrost wydatków w innych działach (materiały, energia itp.). Znaczną kwotę w wysokości 330 600 zł przeznaczono na stypendia doktoranckie. Z tabeli wynika, że dochody i wydatki w przybliżeniu się równoważą.

Obecnie Instytut zatrudnia 109 osób, z czego 93 osoby są opłacane z dotacji statutowej, a 16 osób z grantów. Liczba pracowników naukowych zmalała do 43, w dużym stopniu w związku z przejściem kilku osób na emeryturę. Pracownicy samodzielni stanowią w tej grupie 18 osób. Liczba osób ze stopniem doktora poniżej 35 roku życia wynosi 23 osoby. Liczba ta w ostatnich kilku latach wzrosła bardzo wyraźnie. W ramach Studium Doktoranckiego mieliśmy w 2008 r. w Instytucie 20 doktorantów.

Przedstawiając dorobek naukowy Instytutu, prof. E. Serwicka-Bahranowska podkreśliła wysoki poziom wskaźnika ilości publikacji przypadających na jednego pracownika naukowego, który w bieżącym roku ustabilizował się przyjmując wartość 3,5, przy ciągle wysokiej ogólnej liczbie publikacji (151).

Prof. E. Serwicka-Bahranowska przedstawiła dynamikę wzrostu ilości grantów, będącą wymiernym wskaźnikiem aktywności pracowników w pozyskiwaniu dodatkowych źródeł finansowania. Stwierdziła, że w ostatnich latach obserwuje się wyraźny trend wzrostowy, jeśli chodzi o liczbę projektów zagranicznych (23). Ustabilizowała się liczba grantów własnych (20), mamy też mniej grantów promotorskich (9). Prof. E. Serwicka-Bahranowska podkreśliła, że liczba grantów w niektórych kategoriach przekracza liczbę pracowników samodzielnych, co oznacza, że część z nich prowadzona jest przez młodszych pracowników naukowych.

O rozwoju Instytutu świadczy również rozwój kadry naukowej - w ubiegłym roku zyskaliśmy: jedną profesurę, cztery habilitacje i pięć doktoratów. Jeżeli chodzi o ochronę własności dokonanych wynalazków, to w 2008 roku Instytut uzyskał cztery patenty, a także złożono trzy zgłoszenia patentowe. Należy podkreślić, że jeśli chodzi o udzielone patenty, jest to wynik działalności w latach ubiegłych. Na uzyskanie patentu czeka się bowiem kilka lat (ok. 5 lat).

Łączny opublikowany w 2008 r. dorobek naukowy Instytutu obejmuje 13 artykułów przeglądowych, 101 artykułów w czasopismach o cyrkulacji międzynarodowej, 9 w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji i czasopismach popularno-naukowych, oraz 28 w recenzowanych materiałach konferencyjnych. Aktywność konferencyjna mierzona jest ilością streszczeń w materiałach konferencyjnych – ogółem opublikowano 193 streszczenia.

Z kolei prof. E. Serwicka-Bahranowska zaprezentowała tematykę badań statutowych prowadzonych w Instytucie. Przypomniała, że badania statutowe były obszernie prezentowane w czasie seminarium sprawozdawczego. Obejmują one 6 głównych tematów:

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

Następną grupę stanowią badania realizowane w ramach projektów indywidualnych, finansowanych w postaci grantów ministerialnych. Instytut realizuje aktualnie 19 projektów własnych, z których 4 rozpoczęto w 2008 r., oraz 9 projektów promotorskich, z których 2 zapoczątkowano w 2008 r. Warto zauważyć, że pośród 19 grantów własnych, aż w 11 kierownikami są pracownicy ze stopniem doktora.

Na 36 Konkurs MNiSW zgłoszono 13 projektów, z których 6 rekomendowano do finansowania.

W ubiegłym roku mieliśmy również jeden projekt habilitacyjny dr T. Borowskiego zatytułowany: „Mechanizmy reakcji na mononuklearnych centrach żelazowych i manganowych w niehemowych enzymach aktywujących tlen”.

Realizujemy trzy projekty badawcze typu POL.POST.DOC II, cztery projekty badawcze zamawiane (w przypadku jednego z nich jesteśmy koordynatorem projektu) oraz jeden projekt Inicjatywy Technologicznej.

Realizujemy również projekt badawczy rozwojowy "Sorbent nanostrukturalny do likwidacji skażeń chemicznych", realizowany w konsorcjum z Wojskowym Instytutem Chemii i Radiometrii oraz firmą „RAVIMED”.

Inne rodzaje finansowania to: Krajowe Sieci Naukowe, które oprócz możliwości finansowania umożliwiają tworzenie bardzo silnych więzów pomiędzy jednostkami badawczymi:

- SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce, (prof. P. Warszyński). Sieć koordynowana przez IKiFP PAN;
- PV-TECH Rozwój nowych technologii i technik badawczych w dziedzinie fotoogniw krzemowych (dr R. Socha);
- BIONAN Molekularne mechanizmy oddziaływań w nanoukładach biologicznych oraz w układach aktywnych biologicznie modyfikowanych nanocząstkami (prof. J. Korecki, prof. P. Warszyński);
- ARTMAG Nanostruktury magnetyczne do zastosowania w elektronice spinowej (dr N. Spiridis).

Posiadamy 4 projekty Sektorowych Programów Operacyjnych Europejskich Funduszy Strukturalnych.

Z kolei prof. E. Serwicka-Bahranowska omówiła projekty badawcze finansowane przez instytucje zagraniczne (21 projektów): w tym projekty 6 i 7 Programu Ramowego UE – (10 projektów), które są również istotnym źródłem finansowania.

Oprócz tego realizujemy 4 projekty typu COST, które nie są finansowane przez instytucje zagraniczne, natomiast pozwalają na finansowanie w ramach Ministerstwa, oraz 2 projekty

Mechanizmu Finansowego EOG (tzw. "mechanizm norweski"), a także 7 innych projektów o charakterze bilateralnym.

Na zakończenie przeglądu projektów badawczych prof. E. Serwicka-Bahranowska zaprezentowała uzyskane patenty:

- Patent europejski EU 1416261 "Method and Procedure for Swift Characterization of Foamability and Foam Stability" (K. Lunkenheimer, K. Małysa, G. Wienskol, M. Barańska).
- Wielka Brytania GB 2430394 "Method for Activating a Catalyst" (A.J. Groszek, J. Haber, E. Lalik).
- Polska PL 198563 "Sposób utleniania cykloheksanu" (L. Matachowski, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, A. Janitz, K. Magiełko, S. Szarlik, S. Piechota).
- Polska PL 199571 "Sposób wytwarzania katalizatora do pełnego utleniania zanieczyszczeń organicznych zawierających chlor" (K. Bahranowski, E. Serwicka-Bahranowska, T. Machej, A. Michalik, R. Janik, H. Piekarska-Sadowska, J. Janas).

Wybrane najważniejsze osiągnięcia zespołów Instytutu w ubiegłym roku to:

1. Pd-funkcjonalizowane żywice, katalizatory selektywnego uwodorniania wiązań $C\equiv C$ do $C=C$ (doc. A. Drelinkiewicz, mgr A. Knapik, mgr W. Stanuch);
2. Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe zawierające kazeinę (dr L. Szyk-Warszyńska, dr E. Jarek, dr R. Socha, prof. P. Warszzyński);
3. Teoretyczne modelowanie procesu selektywnej redukcji tlenków azotu (prof. M. Witko, dr P. Hejduk);
4. Właściwości strukturalne i elektronowe metalicznych centrów aktywnych w materiałach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne (prof. E. Broclawik, dr P. Rejmak).

Jeżeli chodzi o stopnie i tytuły naukowe, które zostały przyznane w Instytucie w ubiegłym roku, prof. E. Serwicka-Bahranowska wymieniła: tytuł naukowy profesora nauk chemicznych, uzyskany przez doc. dr hab. Piotra Warszzyńskiego (IKFP PAN), cztery habilitacje: Jarosława Handzlika (Politechnika Krakowska), Jana Kornatowskiego (Max-Panck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim), Tomasza Pańczyka, Pawła Werońskiego, oraz pięć doktoratów: Jakuba Gocłona, Pawła Hejduka, Renaty Tišlovej (Pardubice University), Pawła Rejmaka i Jana Zawały.

Jakkolwiek Instytut ma zasadniczo charakter badawczy, cenimy sobie również wszelkie możliwości wykonywania pracy dydaktycznej. W tej dziedzinie można wymienić prof. E. Broclawik, dr hab. T. Borowskiego i innych. W 2008 r. 9 osób wykonywało w Instytucie pracę magisterską. Przyjęto 3 praktykantów. Nasi pracownicy prowadzą wykłady dla Studium Doktoranckiego (10 osób, w sumie 254 godz. wykładów), a także wykłady poza Instytutem (7 osób, 151 godz. wykładów).

Omawiając współpracę międzynarodową prof. E. Serwicka-Bahranowska podkreśliła, że realizujemy ją głównie w ramach wyżej wymienionych grantów zagranicznych. Współpracujemy z 30 krajami. Wynikiem współpracy międzynarodowej były 42 publikacje w czasopiśmie o obiegu międzynarodowym, 12 w recenzowanych materiałach konferencyjnych, 46 streszczeń w materiałach konferencyjnych oraz 4 patenty lub zgłoszenia patentowe.

Instytut był organizatorem lub współorganizatorem 5 konferencji naukowych, m.in. jubileuszowa konferencja 40th Annual Polish Conference on Catalysis 'Catalysis for Society' (M. Witko, B. Sulikowski), czy inna duża konferencja 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society ECIS 2008 (Z. Adamczyk).

Na zakończenie swego wystąpienia prof. E. Serwicka-Bahranowska podkreśliła, jak ważne dla Instytutu jest upowszechnianie nauki, jej popularyzacja w najszerszym znaczeniu tego słowa. W ramach tej działalności Instytut uczestniczył w Festiwalu Nauki, który odbył się w dniach 14-17 maja 2008 r. w Krakowie.

W Instytucie zorganizowano także spotkanie prof. Gerharda Ertla (laureata Nagrody Nobla w dziedzinie chemii w 2007 r.) z doktorantami, studentami i uczniami.

Organizowaliśmy również "Dzień Otwarty Instytutu", który odbył się 14 listopada 2008 r. Przygotowano 10 wykładów popularnonaukowych oraz 20 stanowisk, gdzie zaprezentowano różne eksperymenty związane z badaniami prowadzonymi w Instytucie. Bardzo pozytywnym objawem jest to, że niektóre wykłady prowadzili młodzi pracownicy.

Przewodnicząca Rady Naukowej prof. M. Nowakowska podziękowała prof. E. Serwickiej za przedstawienie dorobku Instytutu oraz "Sprawozdania z działalności za rok 2008", po czym otworzyła dyskusję nad sprawozdaniem.

Prof. P. Warszyński zwrócił uwagę, że działalność statutowa, wymieniona w sprawozdaniu jako podstawa finansowania, przestała być już podstawą. Prof. M. Witko dodała, że bez niej jednak nie byłoby innej działalności.

Doc. M. Derewiński zapytał, co tworzy tak ogromną kwotę usług, czyli prawie 30% budżetu. Prof. E. Serwicka-Bahranowska wyjaśniła, że kwota ta wynika z faktu, że Instytut posiada ogromny budżet, z dużą ilością grantów, w których często podwykonawcami są osoby, czy zespoły z zewnątrz. Ich działalność jest traktowana jako usługa. Finanse są rozdzielane zgodnie z harmonogramem grantu.

Doc. P. Nowak dodał, że Instytut jest często koordynatorem grantów i przekazuje udziały do innych jednostek. Doc. Derewiński zasugerował, aby w przyszłości przedstawiać bardziej szczegółową analizę finansów. Prof. M. Nowakowska powiedziała, że w sprawozdaniu należałoby uwzględnić instytucje, do których przekazywane są pieniądze.

Prof. J. Korecki wyraził zaniepokojenie w związku ze zmniejszoną liczbą pracowników naukowych. Prof. M. Witko przypomniała, że w ubiegłym roku minął dla wielu osób 9-letni termin ukończenia habilitacji. W przypadku nieukończenia habilitacji w tym okresie, wystąpiła konieczność przeniesienia pracownika naukowego na inny etat. Prof. J. Korecki powiedział, że nawet w tym przypadku osoby takie powinny się znaleźć w grupie pracowników naukowych, ponieważ wykonują nadal pracę naukową, i w ten sposób byłyby uwzględnione w wyliczeniu wydajności. Prof. M. Witko zauważyła, że w przypadku publikacji bierze się pod uwagę liczbę autorów, niezależnie od stopnia naukowego.

Prof. J. Korecki zwrócił uwagę, że w tabeli grantów typu COST brakuje kwoty SPUB dla grantu, którego jest kierownikiem.

Prof. S. Mrowec zwrócił uwagę, na dużą liczbę osób uzyskujących doktorat bądź habilitację. Zapytał, czy Instytut troszczy się o dalszy los tych osób. Prof. E. Serwicka-Bahranowska odpowiedziała, że Instytut pomaga doktorantom wyjechać na staż podoktorski, a po powrocie ze stażu umożliwia zatrudnienie w Instytucie. Jeśli chodzi o habilitantów, to przeważnie pozostają w Instytucie po ukończeniu habilitacji.

Na zakończenie dyskusji prof. M. Nowakowska wyraziła podziw, że pracownicy naukowcy Instytutu posiadają ogromną aktywność, jeżeli chodzi o ilość uzyskiwanych grantów, koordynacji, umów. Tak intensywna działalność jest jednakże blisko granicy bezpieczeństwa; należy uważać, aby nie ucierpiała na tym praca naukowa. Zdziwiała ogromna ilość publikacji i udziału w konferencjach. Zwraca także uwagę ilość wykształconej kadry, która w porównaniu z innymi Instytutami PAN jest bardzo duża.

Wobec braku dalszych głosów odnośnie oceny sprawozdania przewodnicząca Rady Naukowej prof. M. Nowakowska zaproponowała jawne głosowanie nad przyjęciem uchwały akceptującej "Sprawozdanie z działalności Instytutu IKiFP PAN w 2008 r.". Za przyjęciem sprawozdania oddano 19 głosów.

Rada Naukowa przyjęła jednogłośnie do akceptującej wiadomości "Sprawozdanie z działalności IKiFP PAN w 2008 r."

Za zgodność z protokołem

Prof. dr hab. inż. Bogdan Sulikowski
Sekretarz Rady Naukowej IKiFP PAN

