

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

**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2011**



Kraków, luty 2012

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2011	9
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2011	15
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2011	21
Działalność statutowa Instytutu	21
Projekty badawcze własne	65
Projekty badawcze promotorskie	89
Projekty badawcze "Iuventus Plus"	97
Krajowe sieci badawcze	107
Projekty badawcze zamawiane	113
Projekty "Homing Plus" (FNP)	117
Projekty "Pomost" (FNP)	121
Projekty 6. Programu Ramowego UE	125
Projekty 7. Programu Ramowego UE	129
Projekty EU COST Action	137
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	143
Inne międzynarodowe projekty badawcze	153
Inne zadania	157
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2011	163
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	163
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	193
Raport International Advisory Board 2010-2011	223
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	227

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE

INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI

im. JERZEGO HABERA PAN

Od teorii do eksperymentu i zastosowań

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk jest jedyną w Polsce instytucją naukową i jedną z niewielu w świecie, które specjalizują się wyłącznie w badaniach w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni. W Instytucie prowadzi się 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. Prowadzone w Instytucie podstawowe studia teoretyczne i doświadczalne łączą się z badaniami o charakterze stosowanym, mającymi zastosowanie w procesach technologicznych.

W Instytucie zatrudnionych jest ponad 100 pracowników, z których blisko połowa zajmuje stanowiska naukowe. W badaniach uczestniczy ponadto kilkudziesięciu doktorantów.

Działalność badawcza Instytutu obejmuje sześć podstawowych kierunków:

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

W zakresie katalizy kładzie się nacisk na rozwijanie nowych, „inteligentnych” materiałów o dobrze zdefiniowanej strukturze i właściwościach dostosowanych do konkretnych reakcji katalitycznych. Procesy katalityczne stanowiące przedmiot badań wpisują się w nurt „zielonej chemii” i są optymalizowane pod kątem obniżenia energochłonności i eliminacji lub ograniczenia produktów ubocznych.

Szczególnym osiągnięciem w tej dziedzinie było zakończenie badań nad katalitycznymi właściwościami kompleksu rutenu(II) z hemilabilną fosfiną naniesionego na mezoporowatą aluminowaną krzemionkę. Wykazano, że osadzenie kompleksu na powierzchni wolnej od ograniczeń sterycznych niweczy jego właściwości katalityczne. Natomiast wprowadzenie kompleksu do wnętrza kanałów mezoporowatego nośnika, wymusza na skutek przestrzennych ograniczeń ze strony ścian nanoporów taką orientację kompleksu, która prowadzi do wysokiej aktywności katalitycznej.

Głównym celem prac badawczych w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych jest opis zjawiska adsorpcji oraz wyjaśnienie mechanizmu tworzenia i stabilności pian, nanocząstek i cząstek koloidalnych, a także ich oddziaływań, procesy mikroenkapsulacji i biokompatybilności materiałów.

Szczególnym osiągnięciem w tym zakresie badań było określenie kinetyki i mechanizmu adsorpcji fibrynogenu, jednego z najważniejszych białek osocza krwi, odpowiedzialnego za zjawiska krzepliwości, na powierzchniach mikrosfer polimerycznych. Wykazano, że jego adsorpcja zachodzi według mechanizmu nieodwracalnego z szybkością kontrolowaną transportem cząsteczek wewnątrz suspensji, a orientację zaadsorbowanych cząsteczek można w sposób kontrolowany

zmieniać przy pomocy zmian pH oraz siły jonowej. Aspekt praktyczny przeprowadzonych badań wiąże się z opracowaniem nowej metody wytwarzania mikrosfer polimerycznych o kontrolowanym pokryciu i orientacji cząsteczek białka. Układy takie znajdują szerokie zastosowanie w testach immunologicznych o wysokiej selektywności i czułości.

Prace eksperymentalne prowadzi się w ścisłym związku z badaniami teoretycznymi, w których stosuje się metody chemii kwantowej i modelowanie z wykorzystaniem fizyki ciała stałego, jak również metody mechaniki molekularnej i techniki symulacji Monte Carlo.

Dużym osiągnięciem badań teoretycznych było określenie mechanizmu tworzenia związków koordynacyjnych pomiędzy cząsteczką chlorofilu, a wybranymi rozpuszczalnikami organicznymi, co z kolei ma wpływ na ważny przemysłowo proces otrzymywania pochodnych chlorofilu z metalami. We wszystkich badanych układach pięciokoordynacyjnych magnez jest znacząco wysunięty ponad płaszczyznę pierścienia tetrapirolowego i tworzy stosunkowo długie wiązanie z cząsteczkami rozpuszczalnika. Wiązanie szóstego liganda (drugiej cząsteczki rozpuszczalnika) powoduje "wsunięcie" jonu Mg^{2+} w płaszczyznę pierścienia i dalsze wydłużenie wiązań magnez-ligand.

Rezultatem prowadzonych badań są osiągnięcia aplikacyjne obejmujące katalizatory i procesy katalitycznego usuwania zanieczyszczeń środowiska, wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych oraz udoskonalanie materiałów i metod służących ochronie zabytków.

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

Kształcenie

Instytut prowadzi studia trzeciego stopnia - studia doktoranckie w ramach trzech struktur:

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

We współpracy z Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH Instytut prowadzi Międzynarodowe Projekty Doktoranckie „Krakow Interdisciplinary PhD-Project in Nanoscience and Nanostructures”.

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

Współpraca krajowa

Instytut szczeni się wieloletnią tradycją w organizacji i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni w Polsce. Od ponad czterdziestu lat organizuje coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne cieszące się wielką popularnością w środowisku naukowym. Uczestniczy również w pracach kilku krajowych sieci badawczych: Polskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, Klastrze Life-Science, Konsorcjum Nanotech,

Małopolskim Klasterze Technologii Informacyjnych, Małopolsko-Podkarpackim Klasterze Czystej Energii, Konsorcjum Instytutów Polskiej Akademii Nauk PAN-AKCENT oraz Krajowym Konsorcjum „Polski Synchrotron”.

Dla rozwoju interdyscyplinarnych badań Instytut utworzył wspólne laboratoria: „Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur” (z Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH oraz Wydziałem Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej), „Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej” (z Instytutem Fizjologii Roślin PAN i Wydziałem Chemii UJ) 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) oraz SPINLAB tj. „Krajowego Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej”.

Współpraca międzynarodowa

Instytut prowadzi szeroką współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w licznych porozumieniach o współpracy dwustronnej, projektach badawczych kolejnych Programów Ramowych Unii Europejskiej i Europejskiego Obszaru Gospodarczego, a także Programach Operacyjnych Innowacyjna Gospodarka i Kapitał Ludzki, współfinansowanych przez Komisję Europejską. W latach 2002–2006 Instytut otrzymał status Centrum Doskonałości Unii Europejskiej „CATCOLL – Krakowskie Centrum Badawcze Katalizy Molekularnej i Układów Koloidalnych”. Aktywnie współtworzy sieci Inicjatywy COST.

Popularyzacja nauki

Przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach 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 ciekawych eksperymentach i zaznajomić się z profilem badawczym jednostki. Dni Otwarte skierowane są przede wszystkim do uczniów szkół ponadpodstawowych. O ich popularności wśród krakowskich szkół świadczy fakt, że corocznie Instytut odwiedza ok. 1000 osób.

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

ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2011

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

- | | |
|--|----|
| 1.1. Modelowanie właściwości teksturalnych i strukturalnych nanocząstek sit molekularnych | 25 |
| 1.2. Właściwości strukturalne i dynamika w epitaksjalnych nanostukturach metalicznych i tlenkowych badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi | 26 |
| 1.3. Nanomateriały na podstawie minerałów warstwowych | 27 |
| 1.4. Ceramiczne przewodniki protonowe zawierające BaCeO ₃ jako elektrolity dla ogniw paliwowych SOFC | 28 |
| 1.5. Kompozyty zawierające związki niklu i nanorurki węglowe, otrzymane z wykorzystaniem syntetycznych minerałów warstwowych, jako potencjalne materiały anodowe w niskotemperaturowym metanolowym ogniwie paliwowym | 29 |

2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

- | | |
|---|----|
| 2.1. Nowe peroxo-związki Mo(VI), W(VI) i V(V) - synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne | 33 |
| 2.2. Transformacje węglowodorów aromatycznych i terpenowych na sitach molekularnych o różnej kwasowości | 34 |
| 2.3. Nanorurki węglowe jako nośniki heteropolikwasów | 35 |
| 2.4. Wpływ składowej kwasowej na własności katalityczne katalizatorów bifunkcyjnych do syntezy eteru dwumetylowego | 36 |
| 2.5. Ceramiczne strukturalne katalizatory piankowe | 37 |
| 2.6. Badanie właściwości katalitycznych i fizykochemicznych makrocyclicznych anionowych metalokompleksów w liposomach | 38 |

3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy

- | | |
|--|----|
| 3.1. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych oraz mechanizmów aktywacji małych cząsteczek: badania kwantowo-chemiczne | 41 |
| 3.2. Dynamika oscylacyjnej produkcji ciepła w reakcji sorpcji gazowego wodoru w metalicznym palladzie w zależności od rodzaju gazu obojętnego obecnego w mieszaninie reakcyjnej i na powierzchni palladu | 42 |
| 3.3. Porównanie właściwości modyfikowanych heteropolikwasów z układami tlenkowymi | 43 |
| 3.4. Mechanizmy reakcji enzymatycznych: badania metodami teoretycznymi | 44 |
| 3.5. Modelowanie molekularne wybranych poli- i oligosacharydów, ich właściwości strukturalnych oraz oddziaływania z jonami metali | 45 |
| 3.6. Badania teoretyczne przemian strukturalnych w układach zbudowanych z nanorurek węglowych oraz nanocząstek magnetycznych zachodzących pod wpływem pola magnetycznego | 46 |
| 3.7. Mechanizm reakcji cząsteczek NO i CH ₄ na centrach palladowych w mordenicie | 47 |
| 3.8. Badania nad właściwościami koordynacyjnymi chlorofilu w rozpuszczalnikach organicznych | 48 |
| 3.9. Teoretyczne modelowanie rodnikowego mechanizmu reakcji syntazy benzoilobursztynianowej za pomocą małych modeli | 49 |

4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów	
4.1. Oddziaływania elektrostatyczne nanocząstek z naładowanymi powierzchniami z uwzględnieniem efektów wielu ciał	53
4.2. Opracowanie podstaw fizykochemicznych metody wzmocnienia koloidalnego do wyznaczania monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe	54
5.3. Określenie wpływu rozmiarów filmu ciekłego na czas koalescencji pęcherzyków na granicy faz ciecz/gaz	55
5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe	
5.1. Efekty synergiczne w procesach fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza	59
5.2. Modelowanie adsorpcji nanocząstek – wieloskalowy opis teoretyczny kinetyki adsorpcji cząstek kulistych na powierzchni jednorodnej	60
6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury	
6.1. Modelowanie odpowiedzi polichromowanych zabytkowych obiektów drewnianych na zmiany warunków środowiska w ich otoczeniu	63

KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty badawcze własne (MNiSW)

1. N N204 248634 [2008-2011] Kompleksy surfaktantów kationowych o złożonej strukturze cząsteczkowej z polimerami jonowymi jako elementy budowy nanostruktur	67
2. N N204 2490 34 [2008-2011] Badanie heterogenizowanych chiralnych kompleksów rutenu w katalitycznym enancjoselektywnym uwodornieniu ketonów	68
3. 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	69
4. N N301 093036 [2009-2011] Molekularne mechanizmy determinujące specyficzność enzymów zależnych od 2-oksoglutatanu	70
5. N N204 028536 [2009-2012] Opracowanie metody tworzenia biologicznie aktywnych multiwarstw zawierających polielektrolity-białka-dendryty	71
6. N N507 269936 [2009-2012] Nowe nanostrukturalne materiały węglowe, tlenkowe oraz kompozyty węglowo-tlenkowe do budowy superkondensatorów	72
7. N N105 278536 [2009-2012] Emisja akustyczna do monitorowania obiektów muzealnych jako uniwersalna metoda prewencji konserwatorskiej	73
8. N N523 451336 [2009-2011] Kontrolowana adsorpcja jako metoda zapobiegania zanieczyszczeniu środowiska w wyniku utleniania siarczków metali	74
9. N N204 347737 [2009-2012] Teoretyczna i eksperymentalna analiza porowatości wielowarstwowych kulistych cząstek koloidalnych	75
10. N N204 026438 [2010-2013] Nowa metoda ilościowego opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych	76
11. N N204 291238 [2010-2012] Modelowanie teoretyczne kinetyki i równowagi procesów sorpcji jonów metali ciężkich na materiałach pochodzenia biologicznego	78
12. N N204269038 [2010-2013] Biokatalityczna synteza chóralnych alkoholi alkiloheterocyklicznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenowi - teoria i eksperyment -	79

13. N N204 269238 [2010-2013] Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami	80
14. N N507 616638 [2010-2013] Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych SOFC pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro	81
15. N N204 546439 [2010-2012] Nowe metody dyfraktometrii proszkowej w badaniach faz częściowo uporządkowanych, nanometrycznych oraz materiałów o obniżonej wymiarowości	82
16. N N204 546639 [2010-2013] Stabilność, funkcjonalność i mechanizm tworzenia wielowarstwowych struktur polimerowo-kazeinowych	83
17. N N204 205240 [2011-2014] Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego	84
18. N N204 133640 [2011-2014] Wpływ mikro- i nano-pęcherzyków na powierzchniach hydrofobowych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych	85
19. N N204 439640 [2011-2014] Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji transmetylacji porforyny i jej wybranych pochodnych	86
20. N N204 439040 [2011-2014] Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności	87
21. N N209 757340 [2011-2014] Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek	88

Projekty badawcze promotorskie (MNiSW)

1. N N205 0189 34 [2008-2011] Wpływ modyfikacji gęstości elektronowej katalizatora na jego aktywność w procesach utleniania węglowodorów	91
2. N N204 166336 [2009-2011] Określenie konformacji wybranych białek w roztworach wodnych oraz na powierzchniach międzyfazowych o kontrolowanym stopniu heterogeniczności	92
3. N N204 279937 [2009-2011] Właściwości fizykochemiczne i aktywność katalizatorów hybrydowych do jednoetapowej syntezy eteru dwumetylowego z gazu syntezowego	93
4. N N204 137537 [2009-2011] Mechanizmy nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek i wybranych białek na powierzchniach granicznych wyznaczone przy pomocy badań elektrokinetycznych oraz mikroskopii AFM	94
5. N N204 179439 [2010-2012] Wpływ surfaktantów kationowych i PpH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości	95
6. N N105 429140 [2011-2012] Odpowiedź strukturalna zapraw z cementów romańskich na wysychanie	96

Projekty badawcze "Iuventus Plus" (MNiSW)

1. Molekularny mechanizm katalitycznego utleniania węglowodorów przez porfiryny manganu w roztworze i na nośniku [2010-2011]	99
2. Aktywne enzymatycznie wielowarstwowe filmy polielektrolitowe do zastosowań biomedycznych [2010-2011]	100
3. Molekularne podstawy oddziaływań pomiędzy jonami wapnia a wybranymi kwasami poliuronowymi [2010-2011]	101
4. Określenie czynników determinujących stabilność ciekłych filmów powstających podczas zderzenia pęcherzyka gazu z różnymi powierzchniami międzyfazowym [2010-2011]	102
5. Zastosowanie nanocząstek/nanokapsulek do wcelowanego dostarczania substancji terapeutycznych [2010-2011]	103

- | | |
|--|------------|
| 6. Wpływ rodzaju centrum aktywnego i struktury ligandu makrocyklicznego na aktywność katalityczną metalokompleksów w reakcji utleniania fenolu w fazie ciekłej [2010-2011] | 104 |
| 7. Nowe białkowe układy warstwowe [2010-2011] | 105 |
| 8. Mechanizm reakcji redukcji tlenków azotu węglowodorami, katalizowanej mordenitem dotowanym palladem. Symulacje kwantowo-chemiczne [2010-2011] | 106 |

Krajowie sieci badawcze

- | | |
|---|------------|
| 1. EKO-KAT Innowacyjne materiały katalityczne w ochronie ekosystemu (KOORDYNACJA) | |
| 2. SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce (KOORDYNACJA) | 109 |
| 3. MANAR Nowe Materiały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności (KOORDYNACJA) | |
| 4. PV-TECH Rozwój nowych technologii i technik badawczych w dziedzinie krzemowych fotoogniw | 110 |
| 5. BIONAN Molekularne mechanizmy oddziaływań w nanoukładach biologicznych oraz w układach aktywnych biologicznie modyfikowanych nanocząstkami | 111 |
| 6. ARTMAG Nanostruktury magnetyczne do zastosowania w elektronice spinowej | |

Projekty badawcze zamawiane MNiSW)

- | | |
|--|------------|
| 1 0R00003605 [2008-2010] Sorbent nanostrukturalny do likwidacji skażeń chemicznych | 115 |
|--|------------|

Projekty "Homing Plus"(FNP)

- | | |
|---|------------|
| 1. Struktura i właściwości elektryczne filmów kompozytowych zawierających przewodzące nanocząstki [2010-2012] | 119 |
|---|------------|

Projekty "Pomost"(FNP)

- | | |
|--|------------|
| 1. Selektywna hydrogenoliza gliceryny do glikoli <i>via</i> acetonol na katalizatorach heterogenicznych zawierających metale i tlenki metali [2011-2014] | 123 |
|--|------------|

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty 6. Programu Ramowego UE

- | | |
|--|------------|
| 1. EC 6 th FP ERA-NET MNT Projekt PARFUN [2008-2011] Nanoscale Surface Treatments to Functionalise Polymer Particles for Electronic Application (SPR) | 127 |
| 2. EC 6 th FP ERA-NET MNT Projekt NANOREP II [2008-2011] Multifunctional Surface Coatings and Highly Scratch Resistant Plastic Parts (SPR) | 128 |

Projekty 7. Programu Ramowego UE

- | | |
|--|------------|
| 1. EC 7 th FP SCP7-GA-2008-218447 InGAS [2008-2011] Integrated Gas Powertrain – Low Emission, CO ₂ Optimised and Efficient CNG Engines for Passenger Cars and Light Duty Vehicles (CP) | 131 |
| 2. EC 7 th FP CP-IP 229183-2 NEXT-GTL [2008-2011] Innovative Catalytic Technologies & Materials for Next Gas to Liquid Processes(IP) | 132 |
| 3. EC 7 th FP MUST [2008-2012] Multi-level protection of materials for vehicles by "smart" nanocontainers (CP) | 133 |
| 4. EC 7 th FP 212939 SMOOHS [2008-2011] Smart Monitoring of Historic Structures (FRP) | 134 |

5. EC 7th FP 226898 ROCARE [2009-2012] ROman Cements for Architectural REstoration to new high standards (CP) **135**
6. EC 7th FP CP-IP 228867-2 [2009-2013] F³ Factory Flexible, Fast and Future Factory - European Chemistry Consortium Begins the Journey into the Future of Production (IP) **136**

Projekty EU COST Action

1. EC COST D36 [2006-2011] Molecular Structure-Performance Relationships at the Surface of Functional Materials **139**
2. EC COST D43 [2006-2011] Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology **140**
3. EC COST IE0601 [2006-2011] Wood Science for Conservation of Cultural Heritage **141**

Projekty badawcze funduszy strukturalnych UE

1. SPO IG 1.1.2 [2008-2012] MPD Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures **145**
2. PO KL 4.1.1 [2009-2015] ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości **146**
3. PO IG 2.2 [2009-2011] SPINLAB Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do zastosowań w elektronice spinowej **148**
4. PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym **149**
5. PO IG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO Funkcjonalne nano- i mikrocząsteczki – synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach **150**
6. PO IG 2.1.1 [2009-2014] VOX Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych **151**
7. PO IG 1.1 [2010-2013] TEAM-FNP AMON Atomic and Molecular Level Devising of Functional Nanostructures for Magnetic and Catalytic Applications **152**
8. PO KL 4.1.1 [2010-2015] ISD NANOMED Nauki Molekularne dla Medycyny **152**

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. GDRI Francja [2007-2010] Catalysis for Environment: Depollutaton, Renewable Energy and Clean Fuels **155**
2. Projekt międzyrządowy Polski i Austrii [2009-2010] Monowarstwy Fe/W(110): adsorpcja i magnetyzm **155**
3. Projekt Polonium [2010-2011] Epitaksjalne nanostruktury, metaliczne i tlenkowe, badane przy użyciu jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego **156**

INNE ZADANIA

1. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ **159**
2. Wstępna ocena możliwości zastosowania symulacji molekularnych do obliczania adhezji polimerów **160**
3. Badania eksperymentalne nad wydzielaniem renu i jego stopów, a w szczególności stopów o składzie i właściwościach zbliżonych do tak zwanych nadstopów, na podłożu metalicznym na drodze elektrolizy **161**
4. Przeprowadzenie pomiarów grubości warstwy polimerowej techniką spektroskopowej elipsometrii obrazującej oraz analiza struktur termoczułych warstw polimerowych do hodowli komórek **162**

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2011

W ROKU 2011:

realizowano:	6 tematów statutowych – 26 zadań badawczych 38 projektów badawczych (grantów) MNiSW, NCBiR, NCN, FNP (w tym 6 promotorskich, 1 zamawiany) 8 projektów programów ramowych Unii Europejskiej (w tym: 2 projekty 6. PR i 6 projektów 7. PR) 3 projekty UE COST Action 3 inne projekty międzynarodowe 8 projektów Funduszy Strukturalnych UE
opublikowano:	6 prac przeglądowych i rozdziałów w monografiach 69 prac naukowych drukowanych w czasopismach naukowych o cyrkulacji międzynarodowej (oraz 10 ogłoszonych elektronicznie) 16 prac w innych w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji oraz w pismach popularno-naukowych 17 prac w recenzowanych materiałach konferencyjnych 188 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	3 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wyłożono i zaprezentowano:	114 referatów i komunikatów (w tym 15 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 158 posterów
uzyskano:	1 patent
we współpracy z zagranicą:	realizowano 23 tematy opublikowano 25 wspólnych prac w czasopismach naukowych i 3 w recenzowanych materiałach konferencyjnych ogłoszono 21 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 172 wyjazdy pracowników Instytutu za granicę z zagranicy przyjechało 40 osób
zorganizowano:	8 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki stoisko na Pikniku Naukowym IChF PAN w Warszawie
stopień doktora:	uzyskały 2 osoby

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2011

Określenie mechanizmu adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach nośników koloidalnych (lateksów polistyrenowych)

*prof. Zbigniew Adamczyk, dr Anna Bratek-Skicki, mgr Paulina Dąbrowska,
dr Małgorzata Nattich-Rak*

Określono kinetykę i mechanizm adsorpcji fibrynogenu, jednego z najważniejszych białek osocza krwi, odpowiedzialnego za zjawiska krzepliwości, na powierzchniach mikrosfer polimerycznych. Ilość zaadsorbowanego białka wyznaczano przez pomiar zmian ruchliwości elektroforetycznej mikrosfer w połączeniu z metodą AFM dla określenia stężenia fibrynogenu pozostałego w roztworach. Zbadano w sposób systematyczny wpływ siły jonowej oraz pH środowiska na mechanizm adsorpcji fibrynogenu. Wykazano, że jego adsorpcja zachodziła według mechanizmu nieodwracalnego z szybkością kontrolowaną transportem cząsteczek wewnątrz suspensji (dyfuzją). Uzyskane wyniki doświadczalne opisano ilościowo rozwiniętym przez nas modelem teoretycznym, wykazując równocześnie, że dotychczas stosowany model Gouya-Chapmana, postulujący znaczne deformacje cząsteczek białka, jest nieadekwatny. Wykazano w ten sposób, że orientację zaadsorbowanych cząsteczek fibrynogenu można w sposób kontrolowany zmieniać przy pomocy zmian pH oraz siły jonowej I . Np. dla warunków fizjologicznych ($\text{pH}=7.4$, $I=0,15$ M NaCl) występuje płaska orientacja cząsteczek fibrynogenu, podobnie jak dla makroskopowych powierzchni międzyfazowych. Ma to istotne znaczenie poznawcze, wskazując, że wyniki uzyskane dla takich powierzchni modelowych przy pomocy metody potencjału przepływu mogą być z powodzeniem użyte do przewidywania procesów adsorpcji białek w układach praktycznych, np. dla nośników mikrosferycznych. Aspekt praktyczny przeprowadzonych badań wiąże się z opracowaniem nowej metody wytwarzania mikrosfer polimerycznych o kontrolowanym pokryciu i orientacji cząsteczek białka. Układy takie znajdują szerokie zastosowanie w testach immunologicznych o wysokiej selektywności i czułości.

Ograniczenia nanoprzestrzenne w kanałach mezoporowatego nośnika jako czynnik warunkujący aktywność katalityczną organometalicznego centrum aktywnego

*dr Dorota Duraczyńska, prof. Ewa M. Serwicka, dr hab, Alicja Drelinkiewicz prof IKiFP PAN,
dr Dorota Rutkowska-Żbik, prof. Małgorzata Witko, dr Robert P. Socha, dr Małgorzata Zimowska,
dr Zbigniew Olejniczak [IFJ PAN]*

W pracy badano właściwości katalityczne kationowego kompleksu rutenu(II) z hemilabilną fosfiną naniesionego na mezoporowatą aluminiowaną krzemionkę. Wykazano po raz pierwszy, że osadzenie aktywnego katalitycznego kompleksu na powierzchni wolnej od ograniczeń sterycznych niweczy jego właściwości katalityczne, natomiast wprowadzenie centrum aktywnego do wnętrza kanałów mezoporowatego nośnika, w których doświadczają one przestrzennych ograniczeń ze strony ścian nanoporów, jest warunkiem wysokiej aktywności naniesionego układu katalitycznego. Zjawisko to zostało wyjaśnione dzięki połączeniu wszechstronnych badań fizykochemicznych z obliczeniami teoretycznymi. Wykazano, że na powierzchni nośnika wolnej od przestrzennych ograniczeń kompleks adsorbuje się preferencyjnie w sposób dezaktywujący hemilabilny ligand odpowiedzialny za funkcję katalityczną, natomiast adsorpcja w ograniczonej nanoprzestrzeni mezoporów wymusza taką orientację kompleksu, w której jego właściwości katalityczne zostają zachowane. Wykazano, że metoda ^{31}P MAS NMR jest dogodnym narzędziem diagnostycznym, pozwalającym na przewidywanie, czy badany kompleks po osadzeniu na nośniku będzie wykazywał aktywność katalityczną.

Badania nad właściwościami koordynacyjnymi chlorofilu w rozpuszczalnikach organicznych

dr Dorota Rutkowska-Żbik, prof. Małgorzata Witko

Celem badań teoretycznych było zbadanie zdolności do tworzenia związków koordynacyjnych pomiędzy cząsteczką chlorofilu, a wybranymi rozpuszczalnikami organicznymi: acetonitrylem (ACN), imidazolem (Im), metanolem (MeOH), dimetyloformamidem (DMF) oraz pirydyną (Py). Motywacją do podjęcia niniejszych badań stanowił fakt, iż naturalnie występujący chlorofil przekształca się otrzymując jego pochodne z innymi metalami, które mogą znaleźć zastosowanie w przemyśle farmaceutycznym. Stwierdzono, że łatwość wymiany metalu zależy od rodzaju zastosowanego rozpuszczalnika.

Prezentowane badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą w ramach teorii funkcjonałów gęstości (DFT) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z użyciem przybliżenia R_i do wyznaczania całek kulombowskich. Wszystkie elektrony w układzie opisano za pomocą gaussowskich funkcji typu def-TZVP. Badane układy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań i kąty walencyjne) oraz wyznaczono energie wiązania ligandów. Naturę oddziaływań chlorofil-rozpuszczalnik dodatkowo zbadano stosując rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii (SAPT(DFT)). Dodatkowo, metodą czasowo-zależnej teorii funkcjonałów gęstości (TD-DFT), wyznaczono ich teoretyczne widma UV-VIS.

Otrzymane wyniki wskazują, że we wszystkich badanych układach pięciokoordynacyjnych magnez jest znacząco wysunięty ponad płaszczyznę pierścienia tetrapirolowego i tworzy stosunkowo długie wiązanie z cząsteczkami rozpuszczalnika. Zgięta konformacja chlorofilu stabilizuje kompleks dzięki oddziaływaniom elektrostatycznym. Dominującymi w oddziaływaniu chlorofil-rozpuszczalnik są oddziaływania dyspersyjne i indukcyjne. Wiązanie szóstego liganda (drugiej cząsteczki rozpuszczalnika) powoduje "wsunięcie" jonu Mg^{2+} w płaszczyznę pierścienia i dalsze wydłużenie wiązań magnez-ligand. Najsilniejsze wiązania tworzone są z imidazolem, najsłabsze zaś z acetonitrylem. Ten ostatni niechętnie tworzy układy sześciokoordynacyjne, co związane jest z niewielkim udziałem oddziaływań dyspersyjnych między cząsteczką rozpuszczalnika a resztą układu, co pokazano stosując metodę SAPT(DFT). Obliczenia TD-DFT umożliwiły wyjaśnienie obserwowanych eksperymentalnie przesunięć batochromowych widm UV-VIS badanych układów pod wpływem zwiększonego ciśnienia. Odpowiada za nie skrócenie wiązania metal-ligand, nie zaś postulowane wcześniej wsunięcie Mg^{2+} w płaszczyznę pierścienia.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2011:

W roku 2011 zorganizowano 8 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu, stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki i stoisko na Pikniku Naukowym w IChF PAN w Warszawie (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 24 października 2011

Główną ideą zorganizowania w dniu 24 października 2011, corocznego, siódmego z kolei Dnia Otwartego Instytutu było przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych jest niezbędnym warunkiem budowania aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne.

W imprezie wzięło udział około 1000 osób. Odwiedzający mieli okazję wysłuchać następujące wykłady:

- E. Jarek "Czy białe jest białe i dlaczego widzimy świat w kolorach?"
- A. Micek-Ilnicka "Sprzątanie świata bez wysiłku"
- E. Młyńczak, T. Giela "Jak działają wyświetlacze - od kineskopu do e-papieru"
- D. Rutkowska-Żbik "Maria Curie-Skłodowska - Polka Wszechczasów"
- J. Szaleniec, M. Szaleniec "Alchemia - wiedza tajemna, magia, nauka"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Temperatura, ciśnienie i my
- Energia i światło
- Owocowe baterie
- Liofilizacja - co łączy mumie, żywność dla astronautów i katalizatory
- Co można zamknąć w małej kapsułce?
- Tropimy substancje chemiczne w naszym otoczeniu
- Mikro- i nanoświat widziany w mikroskopie skaningowym
- Krystalizacja a odkrycia Marii Skłodowskiej-Curie
- Koloidy – podglądanie świata mikro
- Kataliza pod wysokim ciśnieniem
- Efekt fotoelektryczny w półprzewodniku, czyli jak umyć okna nie ruszając się z fotela

Wykłady popularno-naukowe

- A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska - kobieta niezwykła. Piotr Curie - życie i działalność". Gimnazjum w Mircu, 2011
- A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska - życie i działalność naukowa". Szkoła Podstawowa w Jagodnem, 2011
- A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska - kobieta niezwykła. Piotr Curie - życie i działalność", Miejska Biblioteka Publiczna w Starachowicach, 2011
- A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska i Piotr Curie", Liceum Ogólnokształcące w Skarżysku Kamiennej, 2011.
- M. Zimowska, pokazy naukowe, Szkoła Podstawowa 126 im. KEN w Krakowie, 2011

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- Symposium "Women Sharing a Chemical Moment in Time", Kraków, January 18th, 2011 (M. Witko, D. Rutkowska-Żbik)
- XLIIIOgólnopolskie Kolokwium Katalityczne 'Nowe procesy katalityczne', Kraków, 16-18 marca 2011 (B. Sulikowski)
- International Spring School BES 'Novel Techniques for Nanobiological Sciences', Krakow, May 7th-12th, 2011 (B. Jachimska)
- XXIst International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society (BES), Krakow, May 8th-12th, 2011 (B. Jachimska)
- Konferencja "HITY-2011 Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych", Kraków, 18-20 maja 2011 (M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj)
- Joint Final Conference of COST Actions IE0601 and MP0601, Paris, November 14th-18th, 2011 (R. Kozłowski, Ł. Bratasz)
- EnviControl Final Workshop, Kraków 2011, Krakow, November 23rd, 2011 (R. Kozłowski, Ł. Bratasz)
- Symposium "Women in Science", Warszawa, November 25th, 2011 (M. Witko, D. Rutkowska-Żbik)

Organizacja imprez popularno-naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- Festiwal Nauki 'Materia-Człowiek-Kultura', Rynek Główny, Kraków, 11-14 maja 2011 (M. Derewiński)
- Piknik Naukowy 'Międzynarodowy Rok Chemii, Rok Marii Curie-Skłodowskiej', Instytut Chemii Fizycznej PAN, Warszawa, 2-3 czerwca 2011 (M. Derewiński)
- Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 24 października 2011 (R. Kozłowski)

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

1.1. Modelowanie właściwości teksturalnych i strukturalnych nanocząstek sit molekularnych

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

Sita molekularne, w tym głównie zeolity, stanowią jedną z najważniejszych grup stałych kwasów, szeroko wykorzystywanych jako katalizatory/nośniki w procesach katalitycznych. Jednakże, w szeregu zastosowań, relatywnie niewielkie rozmiary ich mikroporów mogą stanowić istotną przeszkodę, wpływającą na obniżenie efektywności działania tych krystalicznych ciał stałych jako katalizatorów, z uwagi na pojawiające się przeszkody steryczne utrudniające dyfuzję substratów i produktów oraz decydujące o możliwości tworzenia aktywnych kompleksów pośrednich. Ze względu na małe rozmiary porów, wykorzystanie sit molekularnych (w tym zeolitów) jako katalizatorów chemicznej transformacji większych cząsteczek oraz procesów prowadzonych w fazie ciekłej, gdzie procesy dyfuzji odgrywają szczególnie istotną rolę, ma jak dotychczas, charakter marginalny.

Jedną z proponowanych metod otrzymania materiałów o otwartej, hierarchicznej strukturze porowatej jest sieciowanie w większe mezo-/makroporowate układy, nanocząstek zeolitów (cząstek protozeolitycznych, prekursorów zeolitów, nanoziaren). Wiedza na temat warunków koniecznych do ich powstawania, ich struktury, natury i mocy obecnych w nich centrów aktywnych, zależność właściwości od wielkości nanocząstki i jej składu chemicznego, wreszcie informacje odnośnie mechanizmu ich tworzenia mają fundamentalne znaczenie dla zrozumienia mechanizmu tworzenia kryształów sit molekularnych.

Syntezy nanoklasterów protozeolitycznych, zbudowanych z połączonych tetraedrów Si i Al, prowadzono w łagodnych warunkach (temp. poniżej 50⁰C), w obecności kationów czwartorzędowych soli amoniowych, tj. tetrapropylo- (TPA⁺) i tetraetyloamoniowego (TEA⁺), jako organicznych szablonów strukturotwórczych. Opracowano warunki pozwalające na syntezę ultra małych nanocząstek, tj. o wielkości poniżej 10 nm. Badania metodami DLS oraz SEM i TEM pozwoliły na określenie wielkości i morfologii nanoklasterów. Otrzymane zawiesiny koloidalne są trwałe, a obecne w nich nanocząstki nie ulegają agregacji. Badania kinetyczne (NMR) początkowego etapu tworzenia nanocząstek wykazały, że atomy glinu obecne w środowisku syntezy wiążą się z aktywnymi mono-/oligomerami krzemianowymi tworząc izolowane ugrupowania typu Al(OSi)₄, stanowiące centra aktywne. W przypadku wykorzystania żelaza jako T atomu podstawiającego izomorficznie atomy Si w sieci krzemianowej, otrzymanie nanocząstek wymaga zastosowania odmiennych warunków syntezy (znacznie wyższa temperatura, tj. rzędu 100⁰C). Wielkość powstających w takich warunkach nanoklasterów wynosi około 15 nm. Analogiczne warunki zastosowane do układu zawierającego Si i Al, prowadzą do syntezy dużych cząstek, o wielkości dochodzącej do 100 nm. Dodatkowo wykazano, że w otrzymanych nanocząstkach znaczna liczba atomów Fe nie występuje w koordynacji tetraedrycznej, a tym samym nie generuje charakterystycznych dla sit molekularnych, centrów kwasowych typu Brønsteda (Si-OH-Fe). Stwierdzono również, że rodzaj użytego szablonu (TPA⁺ lub TEA⁺) - w przypadku cząstek o wielkości kilku nanometrów, tj. zawierających kilkaset tetraedrów TO₄ - nie wpływa znacząco zarówno na wielkość, i jak i morfologię tworzonych nanocząstek.

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

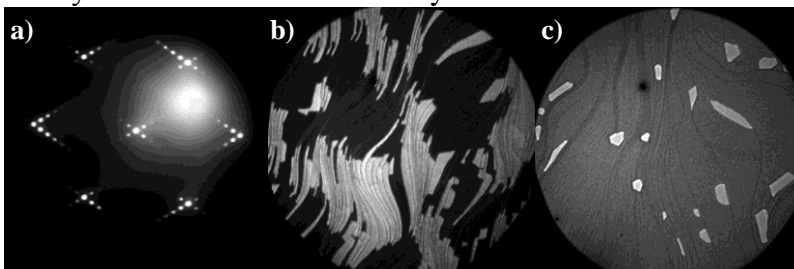
(prof. dr hab. Józef Korecki, dr Nika Spiridis, dr Jacek Gurgul, dr Robert Socha, dr inż. Dorota Wilgocka-Słezak, mgr Barbara Figarska, mgr Kinga Freindl, mgr Tomasz Giela, mgr Ewa Madej), mgr Ewa Młyńczak [współpraca z WFiIS AGH])

Nanostruktury tlenkowe i metaliczne na powierzchni W(110) obrazowane za pomocą mikroskopii LEEM. Mikroskop LEEM (Low Energy Electron Microscope) jest doskonałym narzędziem do badań w skali nano- i mezoskopowej procesów powierzchniowych, takich jak wzrost, nukleacja, adsorpcja i desorpcja, czy reakcje powierzchniowe. W przeciwieństwie do technik skanujących, LEEM umożliwia obrazowanie w czasie rzeczywistym w połączeniu z dużym polem widzenia (do 150 μm) i wysoką rozdzielczością (do 3 nm). Ponadto obrazy i filmy można zbierać w czasie rzeczywistym w temperaturach do 1200°C, zarówno w przestrzeni rzeczywistej jak i odwrotnej, co daje informacje o kinetyce badanych procesów. Pierwsze pomiary wykonane z pomocą nowo nabytego mikroskopu LEEM III firmy Elmitec obejmowały badania nanostruktur na powierzchni W(110).

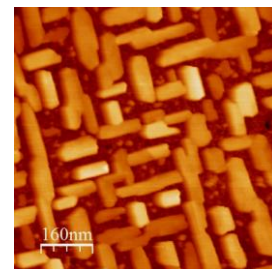
A. Wysokotemperaturowe utlenianie powierzchni W(110). Badano tworzenie się tlenku wolframu WO_2 na powierzchni W(110) w temperaturze 1000 do 1500 K i w atmosferze tlenu przy jego ciśnieniu parcjale 1×10^{-6} mbar. Zobrazowano strukturalne przejście fazowe indukowane temperaturą oraz morfologię domen różnych faz tlenku wolframu, zarówno w przestrzeni rzeczywistej jak i odwrotnej (Rys. 1). Domeny WO_2 na powierzchni W(110) o nadstrukturze w postaci układu rzędów atomowych mogą służyć jako wzorzec do wymuszonego wzrostu nanostruktur żelaza. Z pomocą LEEM zostało udokumentowane formowanie się takich nadstruktur żelaza oraz zoptymalizowano ich wzrost.

B. Nanostruktury żelaza na powierzchni W(110). Ultracienkie warstwy żelaza nanoszone na W(110) w odpowiednio wysokiej temperaturze tworzą trójwymiarowe wyspy o niezwykłych właściwościach magnetycznych, które można powiązać z ich strukturą. Badane były wyspy powstające z warstw Fe o nominalnych grubościach 1.5, 2.5 i 5.0 ML, nanoszonych lub wygrzewanych w podwyższonych temperaturach (300°C-700°C). Analiza zależności współczynnika odbicia elektronów w funkcji energii wykazała obecność kwantowych efektów rozmiarowych związanych z rozmiarami wysp. Wzrost wysp następuje w wyniku procesu dojrzewania Ostwalda, który dominuje zwłaszcza na obszarach z dużą gęstością stopni atomowych podłoża.

Nanostruktury TiO_2 na W(001). Nanostruktury tlenkowe były otrzymywane przez utlenianie naniesionej uprzednio warstewki tytanu w temperaturze 600 °C w kontrolowanej atmosferze tlenu i charakteryzowane technikami STM (Rys. 2), LEED i XPS. Pokazano, że badany system jest doskonałym materiałem na modelowy katalizator.



Rys. 1. Powierzchnia $\text{WO}_2/\text{W}(110)$ obrazowana za pomocą LEEM: a) dyfrakcja, b) obraz w ciemnym polu dla wybranej domeny. Pole widzenia (PW) 10 μm . c) Wyspy uformowane przez wygrzewanie 1.5 ML Fe. PW=5 μm .



Rys. 2. Obraz STM nanostruktur TiO_2 na powierzchni W(001). Średnia wysokość prostokątnych wysp wynosi 3.5 nm.

1.3. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych

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

Celem zadania była modyfikacja porowatych heterostruktur ilastych typu PCH, otrzymanych na osnowie Laponitu (PCH-Lap), w kierunku wygenerowania w tych materiałach centrów kwasowych, co poszerzyłoby możliwość ich zastosowania w katalizie. PCH-Lap jest wysokopowierzchniowym ($677 \text{ m}^2/\text{g}$) kompozytem otrzymanym z syntetycznego, uwodnionego krzemianu magnezu, $\text{Na}_{0.7}[\text{Si}_8\text{Mg}_{5.5}\text{Li}_{0.3}\text{O}_{20}(\text{OH})_4]$ i prekursora krzemowego (TEOS) w obecności surfaktantów jako czynników ukierunkowujących strukturę. Metodą często stosowaną dla wprowadzenia funkcji kwasowej do układów krzemianowych jest aluminowanie, czyli zastąpienia części atomów krzemu przez glin. W obecnej pracy aluminowanie przeprowadzono na dwa sposoby: metodą bezpośrednią, na etapie syntezy PCH-Lap, przez dodanie odpowiedniej ilości izopropanolanu glinu do TEOS-u, oraz metodą posynteżową, przez impregnację otrzymanego PCH-Lap związkami glinu (azotanem lub izopropanolanem) i kalcynację. Otrzymano aluminowane formy układów typu PCH-Lap o $\text{Si}/\text{Al}=40$ i 10 . Widma ^{27}Al MAS NMR pokazały, że glin występuje głównie w formie tetraedrycznej, co potwierdza skuteczność procesu aluminowania. Badania adsorpcji i desorpcji azotu wykazały różnice jakościowe pomiędzy izotermami układów PCH aluminowanych różnymi metodami. Porowate heterostruktury warstwowe aluminowane posynteżowo charakteryzują się, podobnie jak wyjściowy PCH-Lap, izotermą typu IIB z pętlą histerezy H3, przy czym impregnacja związkami Al powoduje spadek powierzchni właściwej, tym większy im więcej wprowadzono glinu. Aluminowanie bezpośrednio zmienia charakter izotermy na typ IVB z pętlą histerezy H2, co wskazuje na inny rodzaj usieciowania systemu porów. Skuteczność procedury aluminowania potwierdziły także badania TPD amoniaku, wskazujące na pojawienie się centrów kwasowych nieobecnych w wyjściowym PCH-Lap. Ich zawartość rośnie wraz z ilością wbudowanego glinu, a moc jest nieco większa dla preparatów aluminowanych posynteżowo. Obecność centrów kwasowych typu Brønsteda potwierdziły wyniki adsorpcji pirydyny monitorowane metodą FTIR oraz testy katalitycznego rozkładu etanolu, w których obserwowano wzrost wydajności do etylenu w miarę zwiększania stopnia podstawienia glinem. Stwierdzono, że właściwości fizykochemiczne posynteżowo aluminowanych preparatów nie zależały w istotny sposób od rodzaju źródła glinu (izopropanolan lub azotan).

1.4. Ceramiczne przewodniki protonowe zawierające BaCeO₃ jako elektrolity dla ogniw paliwowych SOFC

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

Badano możliwości otrzymania ceramicznych elektrolitów na bazie BaCeO₃ i BaZr_{0.9}Y_{0.1}O₃ metodą "gel-casting".

Proszki materiałów: BaCeO₃, BaCe_{0.9}Sm_{0.1}O₃, BaZr_{0.9}Y_{0.1}O₃ (BZY), Ca_{0.05}Ba_{0.95}Zr_{0.9}Y_{0.1}O₃ (C5BZY) i Mg_{0.05}Ba_{0.95}Zr_{0.9}Y_{0.1}O₃ (M5BZY) zostały otrzymane metodą polimeryzacji-kompleksowania z użyciem EDTA. Do wyjściowego roztworu azotanów metali w wodzie destylowanej o stężeniach odpowiadających żądanej stechiometrii dodawano EDTA w roztworze amoniaku. Roztwory odparowywano aż do otrzymania twardego porowatego ciała stałego. Otrzymane prekursory były kalcynowane po 2 godziny w temperaturach 600°C i 1000°C. Otrzymane proszki mielono w młynie wibracyjno-rotacyjnym a następnie formowano z nich płyty metodą „gel-casting” i prażono w temperaturze 1500-1600°C przez 2 godziny.

Właściwości elektryczne i elektrochemiczne otrzymanych tlenków mieszanych były badane metodą chronoamperometryczną i metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej. W warunkach temperaturowych stosowanych w stało-tlenkowych ogniwach paliwowych SOFC proces redukcji tlenu na złączu mikroelektroda metaliczna|elektrolit przewodzący protonowo ma skomplikowany charakter. Przewodnictwo jednej z badanych próbek w funkcji temperatury i składu mieszaniny gazowej przedstawiono na rysunku 1, a wartości przewodnictwa i energii aktywacji zebrano w tabeli 1. BaCeO₃ domieszkowany samarem ma lepsze własności od związku niedomieszkowanego. W atmosferach zawierających H₂, CO i CO₂ stabilność BaCeO₃ jest ograniczona.

Zmierzone przewodnictwa elektryczne C5BZT i M5BZT są wyższe od przewodnictwa BZT. Otrzymane próbki były testowane w SOFC. Zmierzone gęstości mocy dla ogniw z elektrolitami z domieszkowanego BZT były wyższe niż dla ogniwa z niedomieszkowanym BZT jako elektrolitem. Tlenki Ba_{0.95}M_{0.05}Zr_{0.9}Y_{0.1}O₃, M=Ca, Mg mają lepsze właściwości elektryczne i elektrochemiczne od BZT z punktu widzenia zastosowania w SOFC.

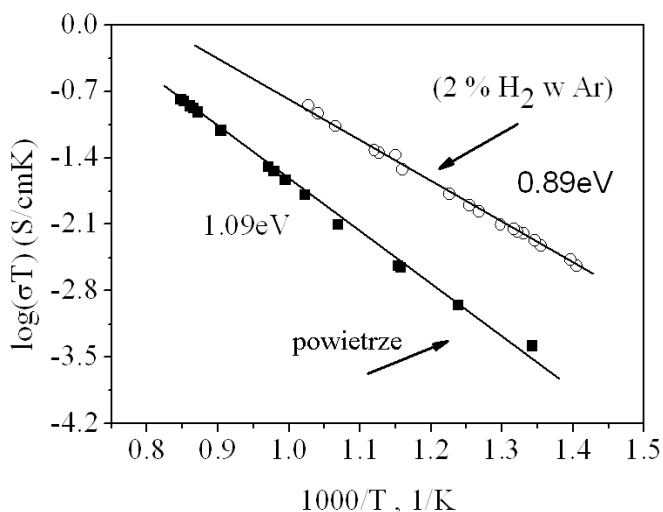


Tabela 1. Przewodnictwa i energie aktywacji badanych elektrolitów: A – Powietrze, H – mieszanina o składzie 98% Ar i 2% H₂

Material	σ (S/cm) 600°C	Ea, eV
BaCeO ₃	5.1·10 ⁻⁶ (A)	1.09 (A)
	1.2·10 ⁻⁵ (H)	0.89 (H)
BaCe _{0.9} Sm _{0.1} O ₃	1.8·10 ⁻³ (A)	0.74 (A)
	7.1·10 ⁻³ (H)	0.67 (H)

Rys. 1. Zależność przewodnictwa BaCeO₃ od temperatury w różnych atmosferach gazowych.

1.5. Kompozyty zawierające związki niklu i nanorurki węglowe, otrzymane z wykorzystaniem syntetycznych mineralów warstwowych, jako potencjalne materiały anodowe w niskotemperaturowym metanolowym ogniwie paliwowym

(dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN, dr inż. Aleksandra Pacuła)

Zadanie obejmowało syntezę oraz charakterystykę właściwości fizykochemicznych i elektrokatalitycznych kompozytów zawierających związki Ni i nanorurki węglowe. Do otrzymania kompozytów wykorzystano materiał o strukturze typu hydrotalkitu zawierający w swoim składzie pierwiastki metaliczne Ni i Al (o stosunku atomowym Ni/Al=2 lub 3). Synteza kompozytów polegała na ogrzewaniu hydrotalkitu w temperaturze 600, 700 lub 800°C w przepływie Ar nasyconego parami CH₃CN. W trakcie syntezy następował termiczny rozkład obu substratów prowadzący do wydzielenia tlenków metali, których część ulegała redukcji do form metalicznych (katalizujących następnie powstawanie nanostruktur węglowych) oraz do wytworzenia depozytu węglowego. Następnie kompozyty zostały potraktowane kwasem, w celu usunięcia części składnika niewęglowego i otrzymania drugiej grupy kompozytów przeznaczonej do badań. Otrzymane materiały proszkowe scharakteryzowano za pomocą XRD, TG, XPS oraz SEM. Aktywność katalityczną otrzymanych kompozytów w reakcji utleniania metanolu w fazie ciekłej badano metodą woltamperometrii cyklicznej w środowisku alkalicznym (0,1 mol dm⁻³ KOH), ponieważ kompozyty w środowisku kwaśnym były nieaktywne. Jako elektrodę pracującą zastosowano elektrodę z węgla szklanego pokrytą badanym kompozytem, a jako elektrodę odniesienia elektrodę chlorosrebrową.

Głównym (60-67%) składnikiem wyjściowych kompozytów był materiał niewęglowy, (Ni, NiAl₂O₄ oraz Al₂O₃). Pozostałą część (33-40%) kompozytu stanowił depozyt węglowy, w tym głównie nanorurki węglowe. Preparaty otrzymane z udziałem hydrotalkitu o stosunku Ni/Al=2 były w mniejszym stopniu krystaliczne w porównaniu z preparatami otrzymanymi z hydrotalkitów o stosunku Ni/Al=3. Kompozyty w wyniku traktowania kwasem traciły znaczną część składnika niewęglowego, którego zawartość spadała do 15-24%.

Najbardziej aktywne w reakcji utleniania metanolu okazały się kompozyty nie traktowane kwasem, zwłaszcza te otrzymane z hydrotalkitu o stosunku Ni/Al=2. Próbkę otrzymaną w niższej temperaturze (600°C) ze względu na obecność mniejszych cząstek Ni w bardziej porowatym otoczeniu były bardziej aktywne od próbek otrzymanych w wyższych temperaturach, które wykazywały mniejszą dyspersję Ni. Traktowanie kompozytów kwasem było niekorzystne, ponieważ prowadziło do zmniejszenia zawartości Ni a przez to do obniżenia ich aktywności. Natomiast w wyniku działania kwasu rozwinięciu uległa powierzchnia właściwa kompozytów, co zapewniło im zwiększoną pojemnością elektryczną.

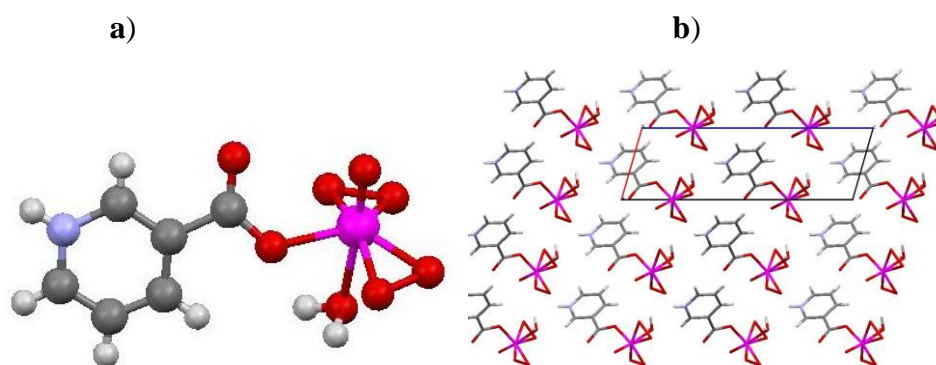
2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

2.1. Nowe perocho-związki Mo(VI), W(VI) i V(V) - synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne

(prof. dr hab. W. Łasocha, dr Dariusz Mucha, mgr Anna Szymańska, mgr Katarzyna Luberd-Durnaś, mgr Marta Grzesiak)

Prowadzone badania dotyczyły syntezy oraz badań strukturalnych nowych nadtlenowych połączeń Mo, W oraz V. Uzyskane w ostatnim okresie czasu, wyniki badań można w skrócie podsumować jako:

1. Z uwagi na obserwację, iż badane nadtlenomolibdeniany kwasu nikotynowego często zawierają grupy N-tlenkowe (jako bloki budulcowe), przeprowadzono szereg syntez, w których zastosowano N-tlenek kwasu nikotynowego jak substrat. Stwierdzono, iż syntezы takie są bardziej powtarzalne i znacznie krótsze.
2. Dokończono udokładnianie struktury jednoskośnego związku aqua-oxo-diperocho-(pyridine-3-carboxylato-O)-molybdenum metodami dyfrakcji monokryształów.
3. Przeprowadzono szereg syntez nowych peroksozwiązkw Mo, W i V z kwasem 2,6-dikarboksypyrydynowym. Jak dotąd nie udało się wyizolować nowych czystych faz w większej ilości, dominującym produktem jest $[\text{NH}_4]_4[\text{O}(\text{VO}(\text{O}_2)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2)]$.
4. Podjęto szereg prób uzyskania nowych diperochosowanadanów z aminopropanem (1-**ap**, 1,3-**diap**, 1,2-**diap**). Uzyskane preparaty są na etapie badań dyfrakcji proszkowej.
5. Przeprowadzono szereg prób syntezy nowych oksodiperochosowanadanów Li, Na, Rb i Cs. W przypadku Rb uzyskano pomarańczowo-żółte kryształy, które są w trakcie badań strukturalnych (dyfrakcja monokryształów), inne związki są na etapie badań metodami XRPD (dyfrakcja proszkowa). Zauważono, iż czynnikiem zaburzającym syntezy był wpływ CO_2 , dlatego też krystalizacje prowadzono w eksykatorach nad nadmiarem stałych zasad, co zdecydowanie poprawiło czystość uzyskiwanych faz.
6. Dla peroksozwiązkw kwasu nikotynowego rozpoczęto testy katalitycznego utleniania wykonywane w IKiFP PAN.



Rys.1. Udokładniona jednostka asymetryczna (a), oraz rzut struktury (b) jednoskośnego związku aqua-oxo-diperocho-(pyridine-3-carboxylato-O)-molybdenum

2.2. Transformacje węglowodorów aromatycznych i terpenowych na sitach molekularnych o różnej kwasowości

(prof. zw. dr hab. inż. Bogdan Sulikowski, dr Ewa Włoch)

Rosnące wymagania odnośnie aktywności i selektywności pracy katalizatorów do procesów lekkiej syntezy organicznej wymagają zrozumienia fizykochemii układów, z których takie kontakty są syntetyzowane. W naszym zespole badamy rozmaite układy zeolitowe, także materiały kompozytowe. Jednym z zeolitów odznaczających się bardzo interesującymi właściwościami jest ferieryt (FER), produkowany w skali przemysłowej. Jest to glinokrzemian przydatny do syntezy katalizatorów o charakterze kwasowym lub, co wykazaliśmy w uprzednich badaniach, także redoksywym. Posiada wysoką gęstość topologiczną węzłów sieci T=Si, Al i zawiera w swej strukturze dużo pierścieni pięcio- i sześcioczłonowych, co rzutuje na jego stabilność.

Do badań użyto dwóch rodzajów ferierytu dostępnego komercyjnie, a mianowicie z firmy japońskiej Tosoh Corp. i amerykańskiej Zeolyst Int. Oba zeolity scharakteryzowano za pomocą szeregu metod, w tym spektroskopii w podczerwieni i spektroskopii NMR. Następnie ferieryt poddano modyfikacji w celu otrzymania formy wodorowej. Wodorowe formy ferierytu przebadano dostępnymi metodami, zwracając szczególną uwagę na rodzaj i ilość wygenerowanych centrów kwasowych Brønsteda. Określono ilość (NMR, IR) oraz moc centrów kwasowych (sorpcja CO). Na centrach kwasowych zeolitów zachodzi szereg reakcji katalitycznych, np. izomeryzacja, transalkilowanie, kraking. Do naszych testów katalitycznych wybrano transformacje węglowodorów terpenowych, α -pinenu i limonenu. Klasa terpenów obejmuje węglowodory o bardzo urozmaiconej budowie. Wśród nich α -pinen jest ważnym przedstawicielem monoterenów, wykorzystywanym do syntezy półproduktów przemysłu chemicznego: kamfenu, limonenu i *p*-cymenu. Natomiast limonen jest jednym z produktów transformacji α -pinenu. Przekształcenie α -pinenu na drodze izomeryzacji jest procesem przemysłowym, katalizowanym przez uwodniony ditlenek tytanu. Katalizator ten wykazuje jednakże szereg wad i dlatego podjęto badania mające na celu zastąpienie go innymi, bardziej wydajnymi kontaktami mikro- i mezoporowatymi o regularnej strukturze posiadającymi centra kwasowe. Przeprowadzone uprzednio badania wykazały przydatność do tego procesu kilku zeolitów różniących się strukturą, składem chemicznym i architekturą porów.

Transformacje α -pinenu i limonenu badano na wodorowych formach ferierytu z firm Tosoh i Zeolyst. Proces katalityczny prowadzono w łagodnych warunkach ($T < 100^\circ\text{C}$) w fazie ciekłej pod ciśnieniem atmosferycznym. Głównymi produktami izomeryzacji α -pinenu były kamfen i limonen. Ferieryty o różnym pochodzeniu charakteryzowały się odmienną selektywnością, co wyjaśniono w oparciu o przebieg transformacji czystego limonenu i właściwości kwasowe obu katalizatorów. Wykazano ponadto, że początkowe szybkości transformacji α -pinenu na katalizatorach ferierytowych przewyższały inne opisane układy, np. $\text{ZrO}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ i heteropolikwas dodekawolframofosforowy osadzony na SiO_2 .

2.3. Nanorurki węglowe jako nośniki heteropolikwasów

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

Celem badań było otrzymanie katalizatora zawierającego heteropolikwas naniesiony na wielościennie nanorurki węglowe (carbon nanotubes CNT). Spośród heteropolikwasów wybrano heteropolikwas, o największej mocy kwasowej, dodekawolframofosforowy $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) i naniesiono go w ilościach odpowiadających 0,25 i 1,0 monowarstwy na powierzchnie nośników. Jako nośniki zastosowano tlenki krzemu i tytanu o dużym rozwinięciu powierzchni właściwej oraz wspomniane nanorurki węglowe. Serię przebadanych katalizatorów wraz z ich powierzchniami BET zestawiono w tabeli. Pozostałe pomiary właściwości fizykochemicznych próbek dotyczyły zbadania ich morfologii (technikami SEM, TEM), zawartości wody (termowaga), składu (technikami EDX, FTIR) i kwasowości próbek (mikrokalorymetryczna sorpcja amoniaku w 150°C).

Nośniki powierzchnia właściwa	Katalizatory HPW/monowarstwa/nośnik	Zawartość HPW [% wag.]	Powierzchnia właściwa katalizatorów [m ² /g]
SiO ₂ 517 m ² /g	HPW / 0,25 / SiO ₂	38,0	222
	HPW / 1,0 / SiO ₂	62,0	110
TiO ₂ 264 m ² /g	HPW / 0,25 / TiO ₂	24,0	14
	HPW / 1,0 / TiO ₂	56,0	12
carbon nanotubes 138 m ² /g	HPW / 0,25 / CNT	14,2	78
	HPW / 1,0 / CNT	39,3	52
---	czysty HPW	100,0	6

Entalpia nieodwracalnej sorpcji amoniaku (ΔH_{irrev}) na kolejnych próbkach, przeliczona na mol amoniaku, jest wielkością proporcjonalną do mocy kwasowej badanych materiałów. Wartość ta pozwoliła określić szereg kwasowości katalizatorów:

$$HPW > HPW/0,25/SiO_2 \cong HPW/0,25/TiO_2 > HPW/1,0/CNT > HPW/0,25/CNT \quad (I)$$

$$[-\Delta H_{irrev}] 235 > 172 \cong 171 > 147 > 78 \text{ kJ} \cdot (\text{mol NH}_3)^{-1}$$

Najniższą moc kwasową posiadały katalizatory z heteropolikwasem naniesionym na nanorurki węglowe, a najwyższą heteropolikwas.

Jako reakcję testową wybrano konwersję etanolu w fazie gazowej. Reakcja ta przebiega na centrach kwasowych, a o jej szybkości decyduje stężenie protonów, stąd też istotne wydawało się użycie katalizatorów o wysokiej mocy kwasowej.

Aktywność katalityczna katalizatorów nośnikowych została porównana z aktywnością katalityczną czystego heteropolikwasu. W temperaturze reakcji poniżej 90°C nie obserwowano produktów reakcji. W zakresie 90-130°C aktywność nie zależała od rodzaju użytego nośnika, powyżej 150°C konwersja etanolu na katalizatorze z nanorurkami węglowymi była wyższa niż w obecności nianiesionego heteropolikwasu. Obserwowano dwa produkty reakcji: etylen i/lub eter dietylowy. Selektywność do poszczególnych produktów zależała od temperatury reakcji i składu katalizatora. W temperaturze reakcji wynoszącej ok. 190°C otrzymano następujący szereg aktywności katalizatorów:



w którym katalizator na CNT zajął znaczące miejsce. Pomimo najniższej kwasowości katalizator HPW/0,25/CNT wykazał znaczną aktywność. Najprawdopodobniej w reakcji konwersji etanolu cechą istotną, obok kwasowości katalizatora, jest jego rozwinięcie powierzchni właściwej, która dla HPW/0,25/CNT wynosiła 78 m²/g. Niestety wprowadzenie nanorurek węglowych jako nośnika fazy aktywnej, heteropolikwasów, w porównaniu z innymi typowymi materiałami tlenkowymi (SiO₂) okazało się niekorzystne.

2.4. Wpływ składowej kwasowej na własności katalityczne katalizatorów bifunkcyjnych do syntezy eteru dwumetylowego

(dr hab. Ryszard Grabowski prof. IKiFP PAN, mgr Michał Śliwa, dr Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, mgr Jan. Mizera)

Komercyjny montmorylonit K10 został użyty jako składowa kwasowa katalizatora hybrydowego. Jako składową metaliczną wykorzystano zsyntetyzowane katalizatory do syntezy metanolu typu Cu/Zn/Al, które otrzymano metodą węglanową oraz cytrynianową. Modyfikacja montmorylonitu K10 polegała na niesieniu jednej monowarstwy heteropolikwasu wolframowo-fosforanowego (HPW). Katalizatory hybrydowe otrzymano na drodze mechanicznego wymieszania ziaren składowej metalicznej oraz kwasowej w stosunku objętościowym 2:1.

Modyfikacja montmorylonitu K10 prowadzi do zmian w powierzchni BET nośnika oraz dystrybucji porów. Na skutek modyfikacji powierzchnia BET montmorylonitu K10 spada z 248 m²/g do 95 m²/g. W obu preparatach dominują mezopory (38Å); spadek w powierzchni BET wynika ze zmniejszenia się ilości oraz objętości porów

Na podstawie analizy UV-VIS określono rzeczywistą ilość naniesionego HPW na nośnik. Dla HPW oraz modyfikowanego nośnika widoczne są te same dwa pasma przy 222 i 265 nm. Są one charakterystyczne dla struktury Keggina i związane są z przeniesieniem ładunku tlen-wolfram, odpowiednio z tlenu mostkowego oraz terminalnego. Obecność tych dwóch pasm świadczy, że HPW został naniesiony na powierzchnię nośnika. Na podstawie tych badań znaleziono, że pokrycie powierzchni nośnika wynosi 0.8 monowarstwy. Na powierzchni montmorylonitu K10 mogą więc występować obszary wzbogacone w HPW (nawet powyżej jednej monowarstwy) lub niepokryte przez HPW.

Pomiary adsorpcji pirydyny (Py) z detekcją w podczerwieni zostały przeprowadzone w celu wyznaczenia stężenia i mocy centrów kwasowych Brønsteda oraz Lewisa w składowej kwasowej katalizatora bifunkcyjnego. Na podstawie uzyskanych wyników stwierdzono, że na powierzchni montmorylonitu K10 obecne są zarówno centra kwasowe Brønsteda (1543 cm⁻¹), jak i Lewisa (1454 cm⁻¹). Natomiast na powierzchni HPW obecne są tylko centra kwasowe typu Brønsteda. W przypadku nośnika montmorylonitowego K10 modyfikowanego HPW w widmie IR intensywność pasma pochodzącego od centrów Brønsteda rośnie i równocześnie przesuwają się w kierunku niższych liczb falowych (1538 cm⁻¹). Tym samym położenie tego pasma pokrywa się z położeniem pasma pochodzącego od centrów kwasowych Brønsteda dla czystego HPW (również przy 1538 cm⁻¹). Na tej podstawie można stwierdzić, że HPW został naniesiony na nośnik montmorylonitowy, co potwierdza wyniki otrzymane z badań spektroskopią UV-VIS. Z kolei intensywność pasma przy 1454 cm⁻¹ nie ulega zmianie, ponieważ sam HPW charakteryzuje się jedynie kwasowością Brønsteda (brak pasma przy 1454 cm⁻¹). Jak wykazały badania adsorpcji pirydyny z detekcją w podczerwieni, naniesienie HPW na nośnik montmorylonitowy K10 prowadzi do wzrostu kwasowości preparatów porównaniu z wyjściowym montmorylonitem K10, o czym świadczy wzrost intensywności pasm.

Test katalityczne wykazały, że modyfikacja kwasowości nośnika ma istotny wpływ na wydajność do DME. Podwyższenie kwasowości nośnika montmorylonitowego K10 na skutek naniesienia HPW prowadzi do zwiększenia aktywności katalizatorów hybrydowych w przypadku, gdy kwasowość samego nośnika jest niewystarczająca do odwodnienia całego metanolu powstającego na centrach "redox" składowej metalicznej.

2.5. Ceramiczne strukturalne katalizatory piankowe

(dr Tadeusz Machej, dr Łukasz Mokrzycki)

Pianki ceramiczne są to materiały charakteryzujące się 80-90% zawartością różnego rodzaju komór i porów w swojej strukturze, co daje możliwość stosowania ich jako filtrów, nośników katalizatorów i/lub w funkcji samych katalizatorów. Ich niejednorodna budowa implikuje bardziej turbulentny przepływ strumienia gazów i daje możliwość pełniejszego wykorzystania możliwości opartego na nich katalizatora.

Realizacja tego zadania obejmowała syntezę pianek ceramicznych oraz fazy aktywnej katalizatora. Jako metodę syntezy pianek ceramicznych wybrano sposób klasyczny tj. syntezę w oparciu o poliuretanowy szkielet. W tym celu wykorzystano pianki poliuretanowe INTERCHEMALL F10 oraz F20 (różna ilość komór na cal). Substratami wykorzystywanymi w syntezie pianek ceramicznych wykorzystane są: PURALOX (Al_2O_3), krzemionka (SiO_2), kaolin, Disperal S, H_3PO_4 , szkło wodne i woda destylowana. Dla szeregu przygotowywanych preparatów, składniki masy ceramicznej zostały zmieszane i rozrztarte w młynku w postaci jednolitej masy. Tak przygotowana masa ceramiczna w następnym kroku została naniesiona na element pianki poliuretanowej o wymiarach 2 x 2 x 5cm. Nadmiar masy ceramicznej został "odciśnięty" i całość pozostawiono do wysuszenia w temperaturze pokojowej. Kolejnymi etapami było wygrzewanie pianki w podwyższonej temperaturze, wypalanie szkieletu organicznego i spiekanie ceramiki w temperaturze 1050°C. W toku prowadzonych dotychczas badań opracowana została powtarzalna metoda syntezy pianek ceramicznych - rysunek 1.



Rys. 1. Szkielet poliuretanowy pokryty masą ceramiczną (lewy) i przykładowa pianka ceramiczna (prawy)

Kolejnym elementem zadania było przygotowanie tlenkowej fazy aktywnej. W tym celu zastosowano metodę odwróconej mikroemulsji (w/o). W metodzie tej wykorzystywana jest faza wodna (roztwór soli), faza oleista (cykloheksan) oraz surfaktant i kosurfaktant (Triton X-100, heksanol). Uzyskano preparaty: a) cerowy (nośnik) CeO_2 , b) manganowy $\text{Mn}_{0,1}\text{Ce}_{0,9}\text{O}_2$ oraz manganowo-miedziowy $\text{Cu}_{0,05}\text{Mn}_{0,05}\text{Ce}_{0,9}\text{O}_2$. Układy te scharakteryzowane zostały pod względem fizykochemicznym: dyfraktometria proszkowa XRD, mikroskopia skaningowa SEM, sonda EDS, w celu analizy składu powierzchni preparatu, jak i katalitycznym. W tym celu próbki katalizatorów sprawdzone z zostały w reakcji spalania toluenu (test w reaktorze przepływowym). Preparaty domieszkowane manganem i miedzią wykazały wyższą aktywność katalityczną.

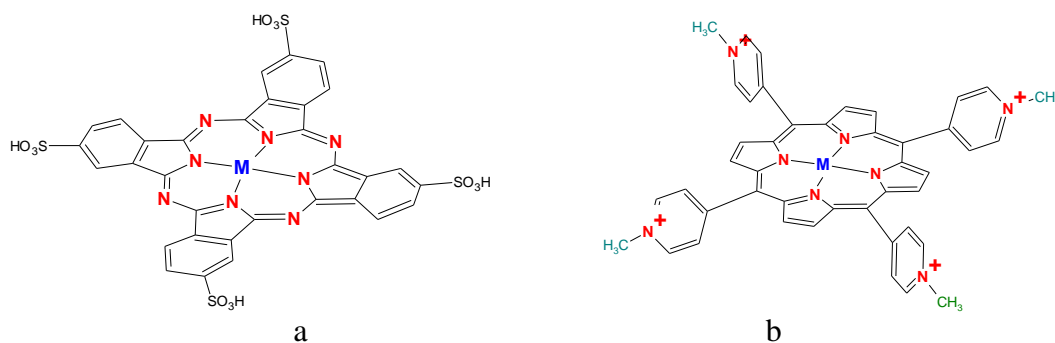
2.6. Badanie właściwości katalitycznych i fizykochemicznych makrocyklicznych anionowych metalokompleksów w liposomach

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

Syntetyczne metaloporfiryny oraz ich analogi, metaloftalocyjaniny zawierające różne grupy polarne takie jak grupy sulfonowe, karboksylowe, aminowe lub amoniowe są szeroko stosowane jako aktywne i selektywne katalizatory epoksydacji olefin i hydroksylacji węglowodorów.

Nanoszenie metalokompleksów na różne nośniki w znacznym stopniu modyfikuje właściwości tych układów. Co więcej pokazano, że naniesione metalokompleksy mogą być bardziej aktywne i selektywne niż kompleksy nienaniesione. Liposomy są dobrymi kandydatami na nośniki dla makrocyklicznych kompleksów metali ponieważ posiadają właściwości biomembranowe oraz zapewniają specyficzne hydrofilowe/liofilowe otoczenie. Liposomy tworzą cząsteczki amfifilowe takie jak fosfolipidy. W odpowiednich warunkach fosfolipidy tworzą dwuwarstwę lipidową w postaci sfery, która jest pusta w środku i wypełniona roztworem, z którego powstała. Otrzymane hybrydy metalokompleksu i liposomu były charakteryzowane różnymi metodami: spektroskopią UV-Vis, pomiarami zeta potencjału i DLS, mikroskopią optyczną i fluorescencyjną.

Głównym celem pracy było zaprojektowanie i synteza makrocyklicznych kompleksów metali immobilizowanych w/n liposomach w celu określenia ich aktywności katalitycznej w reakcji epoksydacji cykloheksenu w obecności NaOCl jako donora tlenu. Następujące anionowe metaloftalocyjaniny MnPcS, FePcS, CoPcS, NiPcS, CuPcS, anionowe metaloporfiryny MnTPPS, FeTPPS, CoTPPS (Rys. 1) oraz te kompleksy immobilizowane w/n liposomach były stosowane jako katalizatory.



Rys. 1. Struktura badanych katalizatorów: a. MPcS, gdzie M=Mn, Fe, Co;
b. MTPPS, gdzie M=Mn, Fe, Co, Cu, Ni.

W reakcji epoksydacji cykloheksenu w obecności NaOCl jako donora tlenu i kompleksów ftalocyjanin i porfiryn powstają trzy produkty reakcji: epoksyd cykloheksenu, 2-cykloheksen-1-on i 2-cykloheksen-1-ol. Spośród badanych kompleksów ftalocyjanin najbardziej aktywny okazał się kompleks CuPcS oraz ustalony został dla nich następujący szereg aktywności:



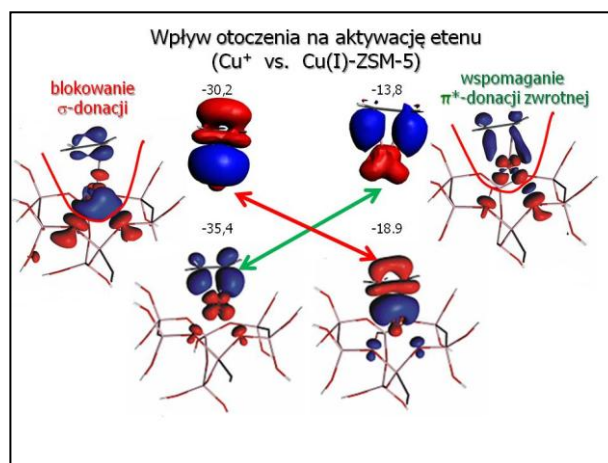
Wszystkie trzy kompleksy porfiryńowe prezentują podobne aktywności, które stanowią w przybliżeniu połowę wartości aktywności najbardziej aktywnych katalizatorów. Nanoszenie kompleksów metali na liposomy powoduje znaczny wzrost ich aktywności katalitycznej, co zostało stwierdzone w przypadku wszystkich badanych katalizatorów.

3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy

3.1. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych oraz mechanizmów aktywacji małych cząsteczek: badania kwantowo-chemiczne

(prof. dr hab. Ewa Broclawik, dr Mariusz Radoń [do maja 2011 doktorant UJ])

Procesy przeniesienia ładunku towarzyszące adsorpcji i ich wpływ na aktywację małych cząsteczek (eten, etyn i formaldehyd) przez kationowe centra Cu^+ i Ag^+ w zeolicie ZSM-5 zostały przeanalizowane metodą ETS-NOCV (Naturalne Orbitale Wartościowości Chemicznej) w modelach uzyskanych z obliczeń QM/MM. Analiza ta pozwala rozłożyć różnicową gęstość elektronową na niezależne kanały, obrazujące przepływy ładunku pomiędzy tymi fragmentami, towarzyszące tworzeniu wiązania. Pokazano, że dominujące kanały przepływu pomiędzy cząsteczką a centrum kationowym to π^* -donacja zwrotna z orbitali d metalu na antywiązące orbitale cząsteczki oraz σ -donacja elektronów wiążących z substratu do kationu. Alternatywny wybór fragmentów ({kation i związany substrat} oraz {sieć}) wyróżnił kanały przepływu elektronów z tlenów sieciowych do kationu o dwu różnych symetriach: przeciwstawny σ -donacji i wspomagający π^* -donację zwrotną.



Rys. 1. Przepływ elektronów pomiędzy etenem oraz Cu^+ bądź Cu(I)-ZSM-5 (górze/dół); kolor czerwony/niebieski reprezentują przyływ/odpływ elektronów. Lewe i prawe okienko ilustrują rolę tlenów sieciowych.

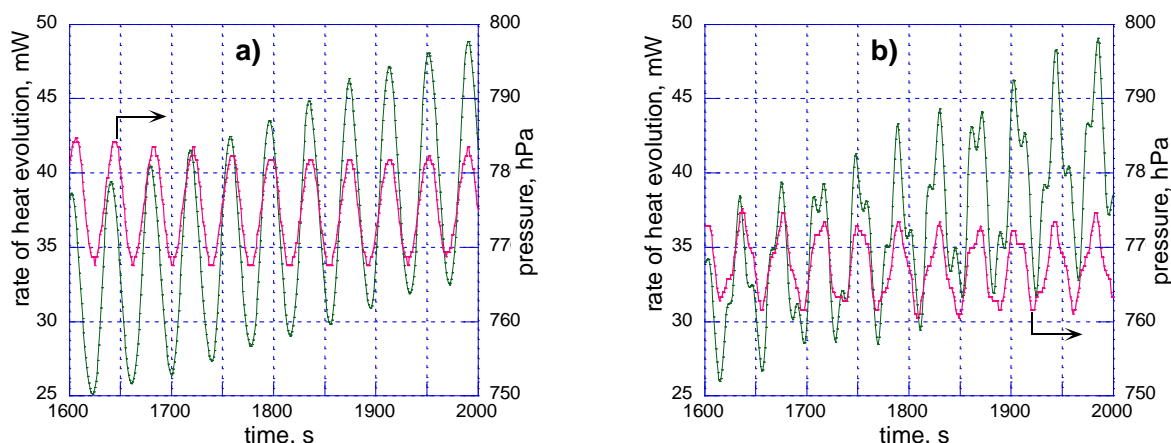
Drugi proces wspomaga aktywację cząsteczki, natomiast pierwszy z nich osłabia zdolności aktywacyjne centrum umieszczonego w sieci, w stosunku do wolnego kationu. Rys. 1 porównuje główne kanały przepływu elektronów oraz ich wagi energetyczne w kompleksach: eten-wolny kation oraz eten-centrum kationowe. Dla wolnego kationu σ -donacja wyraźnie dominuje nad π^* -donacją zwrotną, natomiast dla centrum kationowego w sieci zachodzi wymiana obu typów transferu ładunku. Na rysunku pokazane są także kanały przepływu ładunku z tlenów sieciowych do kationu, które wpływają na aktywność centrum Me(I) . Aktywność centrum (mierzona w widmie spektroskopii IR przez przesunięcie ku czerwieni pasma $\text{C}=\text{C}$) jest wynikiem wpływu sieci na równowagę przeciwstawnych kanałów przepływu ładunku pomiędzy kationem a cząsteczką. Analiza ilościowa tych efektów wraz z obliczonymi przesunięciami pasma IR pokazała, że dla Cu(I) wzrost aktywacji na skutek zwiększenia π^* -donacji zwrotnej kompensuje spadek aktywacji spowodowany blokowaniem σ -donacji, lecz nie przeważa dla Ag(I) . Dlatego sieć zeolitu, działająca jako rezerwuar elektronów może zarówno wspomagać (Cu^+) jak i pogarszać (Ag^+) aktywność centrum kationowego.

3.2. Dynamika oscylacyjnej produkcji ciepła w reakcji sorpcji gazowego wodoru w metalicznym palladzie w zależności od rodzaju gazu obojętnego obecnego w mieszaninie reakcyjnej i na powierzchni palladu

(dr Erwin Lalik)

W roku 2011 kontynuowane były badania oscylacji termokinetycznych zachodzących podczas sorpcji gazowego wodoru w metalicznym palladzie. W eksperymentach używany był mikrokalorymetr przepływowy do gazów firmy Microscal sprzężony ze spektrometrem masowym. Kluczowym warunkiem zachodzenia oscylacji jest dodatek niewielkiej ilości gazu obojętnego do wodoru lub deuteru przed kontaktem ze złożem palladu w celce mikrokalorymetru. Dotychczas, jako inerty używane były N_2 , He, Ne, Ar i Kr. Rodzaj domieszanego gazu okazał się bardzo istotny, ponieważ zostało ustalone, że częstotliwość oscylacji jest funkcją parametrów atomowych tych gazów. Znaleziona została empirycznie liniowa zależność znormalizowanej częstotliwości od pierwszego potencjału jonizacji gazu użytego do wywołania oscylacji, co oznacza, że adsorpcja gazu obojętnego na powierzchni palladu pełni istotną rolę w powstawaniu oscylacji. Badania prowadzone w roku 2011 koncentrowały się na znalezieniu możliwości poszerzenia zakresu eksperymentów poprzez użycie *in situ* technik innych niż mikrokalorymetria.

Problemem, który musi być rozwiązany przed użyciem innych technik obok mikrokalorymetrii jest znalezienie sposobu alternatywnej detekcji oscylującego sygnału reprezentującego proces. Okazało się, że zmiany ciśnienia w układzie powinny dawać możliwość ich użycia do tego celu. Zmiany ciśnienia mogą być detektowane i rejestrowane jednocześnie z oscylacjami termokinetycznymi przy zastosowaniu czujnika ciśnienia. Zaobserwowano, że zmiany ciśnienia ściśle odpowiadają częstotliwościom termokinetycznym, a ponad to, wykazują ten sam, jak te ostatnie, charakter dynamiczny, periodyczny lub quasiperiodyczny (zob. Rys. 1.). W przeciwieństwie do mikrokalorymetru, w którym podczas pomiaru konieczny jest fizyczny kontakt próbki z odbiornikiem ciepła i termistorami, aby był możliwy pomiar, co nie pozostawia miejsca na żadne inne detektory, czujnik ciśnienia może być ulokowany z dala, nawet 2 metry od próbki, co pozwala na umieszczenie samej próbki wewnątrz innego instrumentu. Konkludując, można zaproponować monitorowanie zmian ciśnienia jako alternatywną metodę detekcji i rejestracji oscylacyjnego sygnału reprezentującego sorpcję wodoru w palladzie, pozwalające na jednoczesne zastosowanie *in situ* innych technik do badania mechanizmu powstawania oscylacji.



Rys. 1. Jednoczesność oscylacji termokinetycznych (zielona, ciągła linia) i oscylacji ciśnienia (różowa, przerywana linia) podczas sorpcji mieszaniny $H_2 + Ar$ w palladzie: (a) periodyczne, (b) quasiperiodyczne.

3.3. Porównanie właściwości modyfikowanych heteropolikwasów z układami tlenkowymi

(dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, prof. IKiFP PAN, prof. dr hab. Małgorzata Witko, mgr inż. Piotr Niemiec)

Celem przedstawianego projektu było porównanie właściwości kwasowo-zasadowych centrów aktywnych obecnych w układach tlenkowych (MoO_3 , V_2O_5) i w modyfikowanych wanadem heteropolikwasach molibdenowych (HPA) o strukturze Keggina, w których wanad wprowadzony został w pozycję atomów addenda ($\text{PV}_x\text{Mo}_{12-x}\text{O}_{40}^{-3-x}$). Podstawową jednostką krystalograficzną badanych układów są połączone ze sobą, w różnych konfiguracjach, oktaedry Me-O. Zarówno w tlenkach jak i w strukturze HPA obecne są różne typy centrów metalicznych i tlenowych (o różnej koordynacji i typie sąsiadów), wspólnymi elementami są tleny skoordynowane pojedynczo do atomu metalu (Mo/V) i tleny mostkowe podwójnie skoordynowane do dwóch jonów metali.

Opis właściwości centrów aktywnych wykonano poprzez obliczenia DFT. Dla badanych układów wyznaczono ładunki centrów aktywnych (Tabela 1), widma gęstości stanów, widma IR, energię adsorpcji H oraz scharakteryzowano orbitale graniczne.

	$\text{Mo}_{15}\text{O}_{56}\text{H}_{22}$ (MoO_3)	$\text{V}_{10}\text{O}_{31}\text{H}_{22}$ (V_2O_5)	$\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}^{-3}$ (HPMo)	$\text{PV}_1\text{Mo}_{11}\text{O}_{40}^{-4}$ (HPVMo)	$\text{PV}_2\text{Mo}_{10}\text{O}_{40}^{-5}$ (HPVMo)
Mo/V	1.37 / -	- / 1.32	1.02 / -	0.99 / 0.80	1.02 / 0.80
Mo=O	-0.23	-	-0.37	-0.41	-0.45
V=O	-	-0.28	-	-0.45	-0.48
Mo-O-Mo	-0.41	-	-0.36; -0.42	-0.38; -0.44	-0.40; -0.45
Mo-O-V	-	-	-	-0.34; -0.38	-0.35; -0.36
V-O-V	-	-0.59	-	-	-0.34

Wyznaczone widma gęstości stanów pokazały, że we wszystkich badanych układach pasmo walencyjne w pobliżu poziomu Fermiego zdominowane jest przez orbitale tlenów mostkowych, podczas gdy część środkowa pasma scharakteryzowana jest przez orbitale tlenów pojedynczo skoordynowanych do metalu. Pasmo przewodnictwa zdominowane jest przez jony metali (Mo/V).

Z wyznaczonej analizy populacyjnej Mulikena wynika, że ładunek na centrach metalicznych, pomimo takiego samego formalnego stopnia utlenienia, jest większy w układach tlenkowych niż w HPA. W układach tlenkowych obserwujemy większe, niż w HPA, zróżnicowanie pomiędzy tlenami pojedynczo i podwójnie skoordynowanymi z metalem. Dodatek V w strukturze HPA zwiększa nukleofilowość centrów tlenowych.

Kowalencyjny charakter wiązań, mierzony poprzez wartości indeksów Mayera (BO), jest nieznacznie większy w układach HPA niż w tlenkach (np. Mo=O w HPA BO=1.72, w MoO_3 BO=1.67).

Preferowanym miejscem adsorpcji H w układach tlenkowych jest tlen pojedynczo skoordynowany do metalu (Mo=O, V=O), podczas gdy w układach HPA korzystniejsza energetycznie jest adsorpcja H na tlenach podwójnie skoordynowanych do metalu.

Wyznaczone na drodze teoretycznej widma IR pokazują, że częstotliwości drgań różnych typów centrów aktywnych w układach tlenkowych są przesunięte w kierunku wyższych energii w porównaniu do tych samych typów tlenów w układach heteropolikwasów (np. Mo-O-Mo 993 cm^{-1} w MoO_3 i 931 cm^{-1} w HPMo).

3.4. Mechanizmy reakcji enzymatycznych: badania metodami teoretycznymi

(dr hab. Tomasz Borowski prof. IkiFP PAN, mgr Anna Wójcik, mgr Anna Miłaczewska)

Jeden z projektów badawczych dotyczył mechanizmu reakcji katalitycznej dla zależnej od Cu oksygenazy katalizującej utlenianie grup fenolowych do katecholi, to jest tyrozynazy. Wyniki dwóch uprzednich badań poświęconych mechanizmowi tyrozynazy były wyraźnie ze sobą sprzeczne. Na podstawie badań czysto kwantowo-chemicznych, w których wykorzystano dość niewielkich rozmiarów model miejsca aktywnego, zaproponowano mechanizm, w którym substrat (tyrozyna) jest zdeprotonowany przed reakcją z tlenem. W następnym etapie reakcji ligand ponadtlenkowy dokonuje ataku elektrofilowego na pierścień fenolanu. W innych, późniejszych badaniach, przeprowadzonych z wykorzystaniem hybrydowej metody QM/MM w modelu zostało uwzględnione całe białko, a w zaproponowanym mechanizmie mostkowy ligand O_2H ulega rozcięciu homolitycznemu. Tego typu mechanizm został uprzednio odrzucony gdyż charakteryzował się bardzo dużą barierą dla rozcięcia wiązania O-O. W ramach tego projektu staraliśmy się znaleźć przyczynę tych rozbieżności wykonując nowe obliczenia QM oraz QM/MM, w których pokazaliśmy, że w uprzednich obliczeniach QM/MM optymalizacja geometrii doprowadziła do wysokoenergetycznego minimum lokalnego dla kompleksu enzym-substraty. Dla właściwie zoptymalizowanych geometrii bariera dla mechanizmu z homolitycznym rozcięciem O-O jest zarówno w obliczeniach QM jak i QM/MM bardzo wysoka.

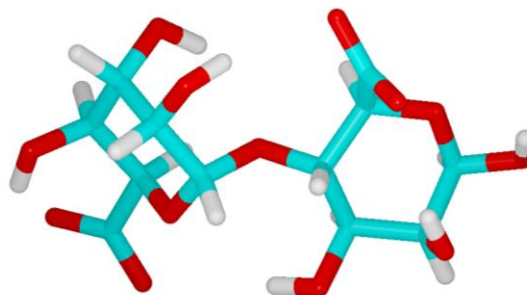
Kolejny projekt badawczy koncentrował się na mechanizmie zależnego od O_2 rozcięcia alifatycznego wiązania C-C, reakcji katalizowanej przez zależną od Ni(II) dioksygenazę acireduktonu. Reakcja O_2 z anionem $[PhC(O)C(OH)C(O)Ph]^-$, który jest syntetycznym modelem naturalnego acireduktonu, została przebadana metodami DFT a otrzymane wyniki potwierdzają mechanizm, w którym pierwszym etapem jest proces red-ox prowadzący do utworzenia 1,3-diphenylpropanetrionu i HOO^- . W następnym kroku trion i HOO^- reagują ze sobą tworząc 5-członowy cykliczny nadtlenuk, który ulega rozkładowi z uwolnieniem CO i dwóch równoważników $PhCOO^-$. Alternatywna ścieżka reakcji angażująca tlen cząsteczkowy i anionorodnik acireduktonu, która jest preferowanym mechanizmem dla naturalnego acireduktonu, okazała się zawierać znacząco wyższą barierę.

Ostatni problemem, którym zajmowaliśmy się w 2011, dotyczył mechanizmu reakcji między dioksygenazą intradiolową a związkiem nadtlenkowym, który w uprzednich badaniach doświadczalnych pełnił rolę cząsteczki sondy. W badaniach tych zaobserwowano produkt rozcięcia wiązania O-OH, co zinterpretowano jako argument przemawiający za powstawaniem reaktywnego układu $Fe(IV)=O$. W naszych obecnych badaniach komputerowych reakcja dioksygenazy intradiolowej z cząsteczką sondą została przebadana z wykorzystaniem pięciu różnych modeli, i najważniejszym wnioskiem z tych badań jest to, że układ oksoferylowy najprawdopodobniej nie tworzy się w jej przebiegu. Preferowany kanał reakcji to ten, w którym rozcięciu wiązania O-O towarzyszy 1-elektronowe utlenianie ligandu fenolanowego - tyrozyny.

3.5. Modelowanie molekularne wybranych poli- i oligosacharydów, ich właściwości strukturalnych oraz oddziaływania z jonami metali

(prof. dr hab. Władysław Rudziński, dr Wojciech Płaziński)

Badania skupione były na poli- i oligosacharydach zbudowanych z jednostek kwasów α -L-guluronowego (G) i β -D-mannuronowego (M). Ww. dwie jednostki wchodzi w skład naturalnych, nierozgałęzionych biopolimerów, alginianów. Obie jednostki zawierają grupy karboksylowe, mogą więc występować w formach sprotonowanych oraz zdeprotonowanych, zależnie od pH środowiska. Rozważano dwa odrębne aspekty: (1) oddziaływania jonów wapnia z anionowymi formami łańcuchów (o nieskończonej długości oraz oktamerów) zawierających wyłącznie jednostki G; (2) oddziaływania łańcuchów zbudowanych z jednostek G oraz (naprzemiennie) M i G z cząsteczkami wybranych związków fenolowych (tj. fenolu, *o*-chlorofenolu i *p*-chlorofenolu). Pierwsza część badań obejmowała m.in. reparametryzację pola siłowego GROMOS96 względem parametrów odpowiadających za oddziaływania niewiążące obejmujące ujemnie naładowane jednostki uronianów oraz jony wapnia. Druga część pozwoliła na identyfikację typów oddziaływań odpowiedzialnych za wiązanie związków fenolowych przez łańcuchy alginianów.



Rys. 1. Struktura disacharydu zbudowanego z jednostek kwasów α -L-guluronowego (G, po lewej) oraz β -D-mannuronowego (M, po prawej) po optymalizacji geometrii metodą półempiryczną PM3

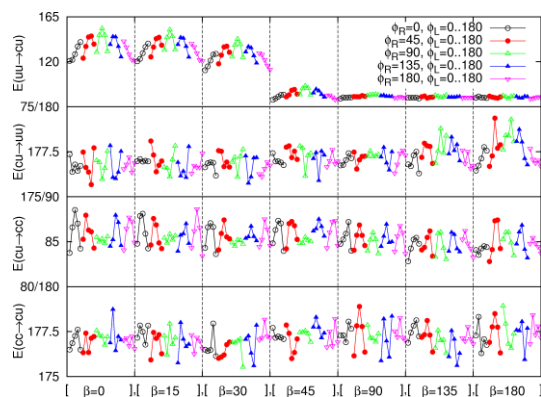
3.6. Badania teoretyczne przemian strukturalnych w układach zbudowanych z nanorurek węglowych oraz nanocząstek magnetycznych zachodzących pod wpływem pola magnetycznego

(dr hab. Tomasz Pańczyk prof IKiFP PAN)

Sprzężenie nanorurki węglowej z nanocząstką magnetyczną poprzez łańcuch alkiłowy prowadzi do powstania makrocząsteczki której struktura determinowana jest przez balans pomiędzy oddziaływaniami dyspersyjnymi, magnetycznymi oraz parametrami wiązań chemicznych w łańcuchu alkiłowym. Powstaje, zatem układ, którego właściwości nie da się przewidzieć na podstawie wiedzy ogólnej o poszczególnych komponentach makrocząsteczki.

Przeprowadzono, zatem szereg obliczeń mających na celu zbadanie, w jaki sposób pewne kluczowe parametry układu wpływają na jego strukturę w warunkach normalnych oraz po przyłożeniu zewnętrznego pola magnetycznego. Obliczenia prowadzono metodą Monte Carlo przy wykorzystaniu oryginalnego pola siłowego złożonego z potencjału Dormann-Bessais-Fiorani (oddziaływanie pomiędzy dipolami magnetycznymi), potencjału Hamakera (oddziaływanie dyspersyjne nanocząstka-nanorurka), potencjału Yukawy (oddziaływanie pomiędzy naładowanymi nanocząstkami koloidalnymi), potencjału skrętno-torsyjnego (łańcuch alkiłowy) oraz standardowego potencjału Lennard-Jonesa.

Stwierdzono istnienie silnych barier energetycznych towarzyszących zmianie konfiguracji polegającej na transferze nanocząstki magnetycznej pomiędzy ścianą boczną nanorurki a jej końcówką (tip). Co więcej, zakres tych barier zmienia się znacznie w zależności od wzajemnej konfiguracji punktów przyłączenia łańcucha alkiłowego na obwodzie końcowego pierścienia nanorurki, a także, od wzajemnej konfiguracji przestrzennej momentów magnetycznych nanocząstek (Rys. 1).



Rys.1. Bariery aktywacji dla układu złożonego z nanorurki (45,0) oraz nanocząstek o średnicy 90Å, jako funkcje punktów przyłączenia łańcucha alkiłowego oraz konfiguracji momentów magnetycznych.

Stwierdzono, że spontaniczna zmiana struktury układu może zachodzić tylko w jednym kierunku i to tylko dla niektórych kombinacji parametrów układu. Mianowicie, możliwy jest spontaniczny transfer nanocząstki od ścianki bocznej do końcówki nanorurki, przy czym w żadnym przypadku nie jest to proces szybki. Transfer w kierunku odwrotnym nie jest możliwy bez dostarczenia do układu energii z zewnątrz. Stwierdzono, że ekspozycja w zewnętrznym polu magnetycznym może być takim czynnikiem. Jednakże, dodatkowym warunkiem jest, aby nanocząstki magnetyczne wykazywały pewne specyficzne konfiguracje momentów magnetycznych.

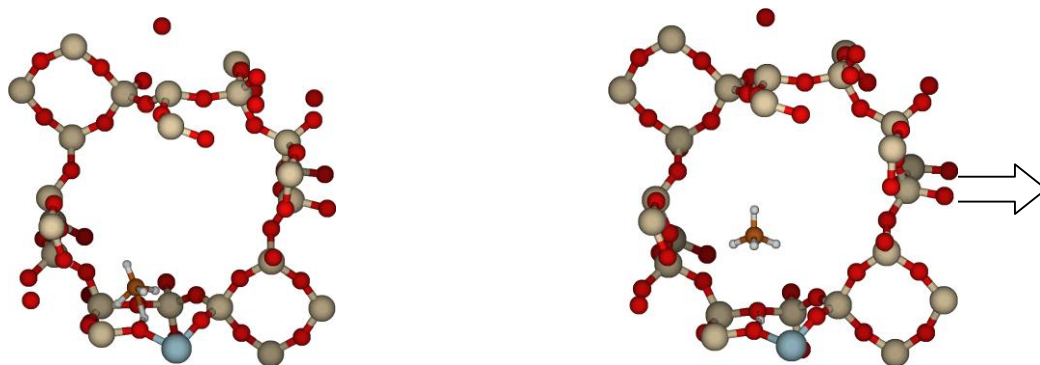
3.7. Mechanizm reakcji cząsteczek NO i CH₄ na centrach palladowych w mordenicie

(dr Robert Gryboś)

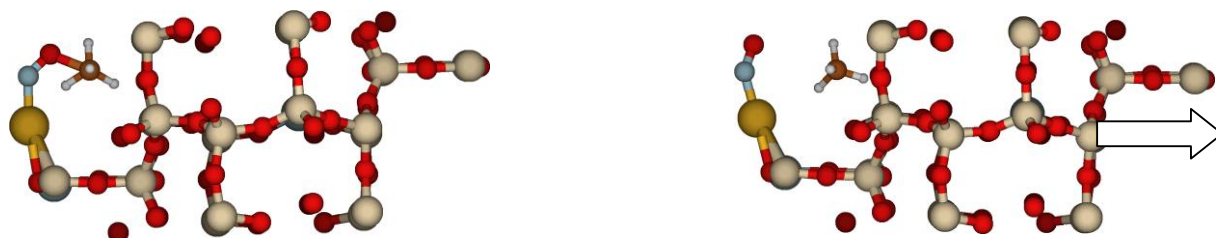
Przeprowadzono symulacje kwantowo-chemiczne periodyczną metodą DFT przy użyciu programu VASP, funkcjonałów typu GGA i pseudopotencjałów PAW.

Ze względu na najwyższą energię wiązania C-H wśród węglowodorów, aktywacja cząsteczki metanu jest wyjątkowo trudna. Mimo usilnych poszukiwań, nie udało się znaleźć sposobu na adsorpcję metanu ani na centrach palladowych ani na centrach kwasowych (zarówno Brønsteda jak i Lewisa) w mordenicie. Brak prekursora aktywacji, jakim jest adsorpcja, uniemożliwił znalezienie ewentualnego stanu przejściowego.

Jedną z dróg aktywacji metanu jest jego protonacja z utworzeniem kationu karbeniowego CH₅⁺. Próby utworzenia kationu karbeniowego CH₅⁺ poprzez umieszczenie metanu w bezpośrednim sąsiedztwie centrum Brønsteda nie powiodły się - metan nie wchodził w reakcję z centrum kwasowym. Także umieszczenie wstępnie zoptymalizowanej cząsteczki CH₅⁺ w centrum kanału zeolitowego zakończyło się niepowodzeniem – kation karbeniowy migrował w pobliże centrów Al, gdzie oddawał proton i desorbował jako obojętna cząsteczka metanu.



Co więcej, próby przeprowadzenia reakcji między metanem i tlenkiem azotu wg mechanizmu Langmuira-Rideal'a, tj. zbliżenie cząsteczki CH₄ z fazy gazowej do cząsteczki NO zaadsorbowanej na centrum metalicznym także nie dały pozytywnych rezultatów. Metan nie reaguje z aktywowaną molekułą NO i przesuwa się z powrotem w kierunku centrum kanału zeolitowego.



Dalsze możliwości obejmują:

1. aktywację metanu na defektach szkieletu zeolitowego - wymaga to przeprowadzenia wstępnych badań nad sposobem defektowania struktury mordenitu,
2. wysoko-temperaturową aktywację metanu wg mechanizmu Langmuira-Rideal'a - wymagane są długotrwałe symulacje techniką Molecular Dynamics.

3.8. Badania nad właściwościami koordynacyjnymi chlorofilu w rozpuszczalnikach organicznych

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

Celem badań teoretycznych było zbadanie zdolności do tworzenia związków koordynacyjnych pomiędzy cząsteczką chlorofilu, a wybranymi rozpuszczalnikami organicznymi: acetonitrylem (ACN), imidazolem (Im), metanolem (MeOH), dimetyloformamidem (DMF) oraz pirydyną (Py). Motywacją do podjęcia niniejszych badań stanowił fakt, iż naturalnie występujący chlorofil przekształca się otrzymując jego pochodne z innymi metalami, które mogą znaleźć zastosowanie w przemyśle farmaceutycznym. Stwierdzono, że łatwość wymiany metalu zależy od rodzaju zastosowanego rozpuszczalnika.

Prezentowane badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą w ramach teorii funkcjonałów gęstości (DFT) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z użyciem przybliżenia R_i do wznaczenia całek kulombowskich. Wszystkie elektrony w układzie opisano za pomocą gaussowskich funkcji typu def-TZVP. Badane układy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań i kąty walencyjne) oraz wyznaczono energie wiązania ligandów. Dodatkowo, metodą czasowo-zależnej teorii funkcjonałów gęstości (TD-DFT) wyznaczono ich teoretyczne widma UV-VIS.

Otrzymane wyniki (patrz: Tabela) wskazują, że we wszystkich badanych układach pięciokoordynacyjnych magnez jest znacząco wysunięty ponad płaszczyznę pierścienia tetrapirolowego i tworzy stosunkowo długie wiązanie z cząsteczkami rozpuszczalnika. Wiązanie szóstego liganda (drugiej cząsteczki rozpuszczalnika) powoduje "wsunięcie" jonu Mg^{2+} w płaszczyznę pierścienia i dalsze wydłużenie wiązań magnez-ligand. Najsilniejsze wiązania tworzone są z imidazolem, najslabsze zaś z acetonitrylem. Ten ostatni niechętnie tworzy układy sześciokoordynacyjne, co związane jest z niewielkim udziałem oddziaływań dyspersyjnych między cząsteczką rozpuszczalnika a resztą układu, co pokazano stosując metodę SAPT(DFT). Obliczenia TD-DFT umożliwiły wyjaśnienie obserwowanych eksperymentalnie przesunięć batochromowych widm UV-VIS badanych układów pod wpływem zwiększonego ciśnienia. Odpowiada za nie skrócenie wiązania metal-ligand, nie postulowane wcześniej wsunięcie Mg^{2+} w płaszczyznę pierścienia.

Tabela. Wyznaczone długości wiązań Mg-L – r [Å], wysunięcie Mg ponad płaszczyznę pierścienia – d [Å] oraz energie wiązania ligandów – E [kcal/mol].

L 1	L 2	r1	r2	d	E1	E1
ACN	-	2.24	-	0.32	-13.1	-
Im	-	2.20	-	0.38	-18.8	-
DMF	-	2.11	-	0.27	-13.5	-
MeOH	-	2.15	-	0.30	-14.3	-
CAN	ACN	2.38	2.37	0.00	-2.6	-4.4
ACN	Im	2.46	2.28	0.00	-1.6	-7.2
Im	Im	2.34	2.33	0.00	-6.3	-6.5
MeOH	MeOH	2.24	2.24	0.00	-7.1	-7.7
DMF	DMF	2.24	2.25	0.00	-5.8	-5.8
Py	Py	2.43	2.39	0.00	-5.1	-5.3

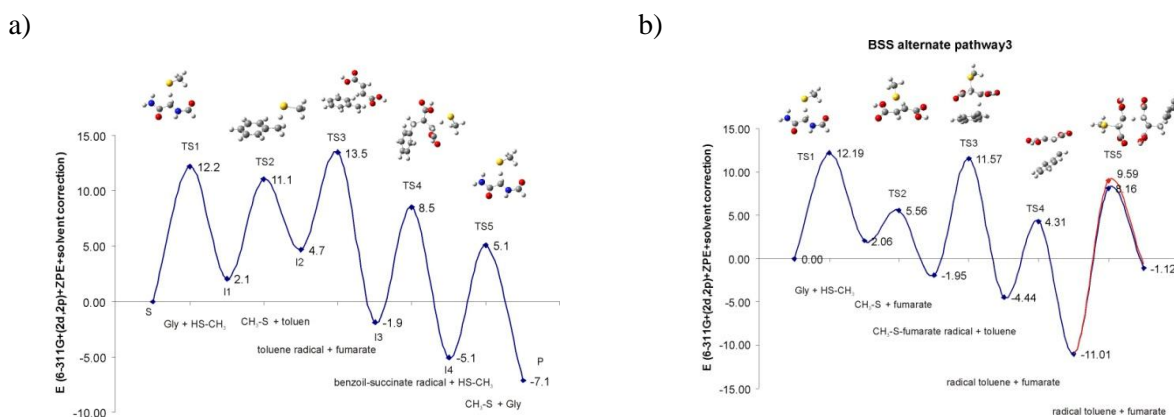
3.9. Teoretyczne modelowanie rodnikowego mechanizmu reakcji syntezy benzoilobursztynianowej za pomocą małych modeli

(prof. dr hab. Małgorzata Witko, dr Maciej Szaleniec)

W celu modelowania mechanizmu reakcji syntezy benzoilobursztynianowej (BSS) przeprowadzono obliczenia kwantowo-chemiczne z wykorzystaniem małych modeli organicznych reprezentujących substraty i ich aktywowane pochodne oraz modelowe reszty reaktywnych aminokwasów. Celem badań modelowych było umożliwienie interpretacji eksperymentalnych wyników kinetycznych i spektroskopowych (EPR) przeprowadzonych przez współpracującą z Instytutem grupę prof. Heidera z Uniwersytetu w Marburgu.

Metodologia obliczeń polegała na przebadaniu ścieżek reakcji poszczególnych par reagentów, wyznaczeniu energii substratów, produktów oraz stanu przejściowego zarówno w próżni jak i w modelowym rozpuszczalniku o przenikalności dielektrycznej równej 4. Optymalizacje geometrii, analizę wibracyjną oraz obliczenia poprawek solwatacyjnych przeprowadzono z wykorzystaniem teorii DFT (funkcjonał B3LYP) w bazie 6-31g(d,p). Dodatkowo ostateczne energie reagentów obliczono z zastosowaniem wysokiej bazy funkcyjnej typu TZV (6-311+g(2d,2p)).

W pierwszej kolejności obliczono klasyczny mechanizm reakcji zakładający przeniesienie rodnika z Gly na Cys i następnie rodnikową aktywację toluenu, który następnie reaguje z kwasem fumarowym, co prowadzi do rodnikowego benzoilobursztynianu. Ten produkt pośredni reaguje z Cys dając produkt (benzoilobursztynian) z jednoczesnym odtworzeniem rodnika glicynowego. Taki proces wykazuje najwyższą barierę energetyczną przy reakcji rodnika benzyłowego z fumaranem (13.5 kcal/mol) i jest energetycznie korzystny ($\Delta(E+ZPE)=-5.1$ kcal/mol). Następnie przebadano **ścieżkę alternatywną 1**, zakładającą najpierw reakcję fumaranu z rodnikiem cysteinowym, aktywację toluenu przez rodnik cysteinylfumaranowy i reakcję rodnika benzyłowego z cysteinylbursztynianem. Ta ścieżka reakcji wykazywała jednak zbyt dużą barierę na ostatnim etapie reakcji (35 kcal/mol). Wykluczono też **ścieżkę alternatywną 2** zmierzającą do odtworzenia fumaranu po aktywacji toluenu (bariera 55 kcal/mol), jak również, w której aktywowany toluen reagowałby z drugą cząsteczką fumaranu, a następnie rekombinował z cysteinylbursztynianem dając w rezultacie produkt i odtwarzając rodnik (**ścieżkę alternatywną 3** - bariera ok. 20 kcal/mol) - patrz Rys. 1. Podsumowując, oryginalnie zaproponowana ścieżka reakcji wciąż wydaje się najbardziej prawdopodobnym mechanizmem BSS.



Rys. 1. Ścieżki reakcyjne BSS a) ścieżka klasyczna, b) 3 ścieżka alternatywna

Dodatkowo przeprowadzono obliczenia reaktywności enzymy z innymi substratami i inhibitorami. Wyniki te będą cenną pomocą w interpretacji biochemicznych wyników eksperymentalnych i dalszej walidacji mechanizmu BSS.

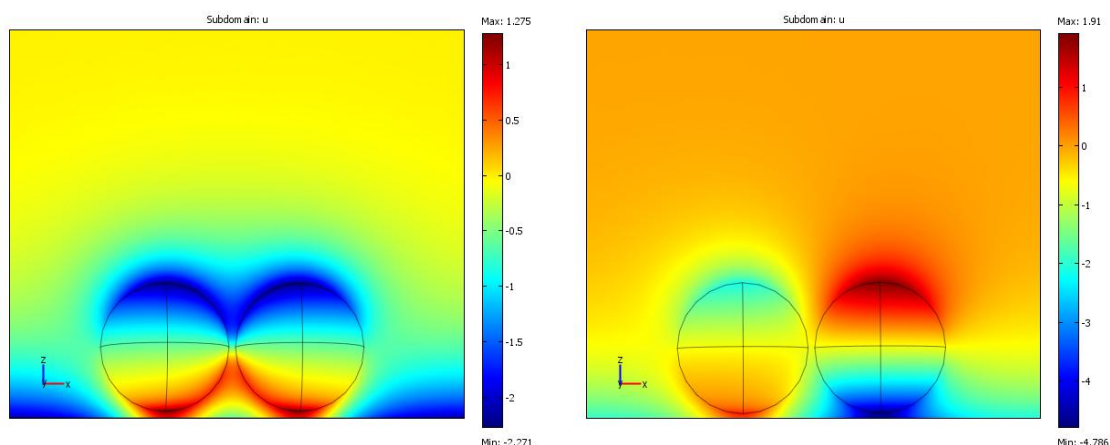
4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów

4.1. Oddziaływania elektrostatyczne nanocząstek z naładowanymi powierzchniami z uwzględnieniem efektów wielu ciał

(prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński)

Rzeczywiste metody numeryczne umożliwia modelowanie oddziaływań elektrostatycznych skomplikowanych układów nanocząstek charakteryzujących się nierównomiernym rozkładem ładunku powierzchniowego. Dotyczy to zwłaszcza globularnych protein, które charakteryzują się domenową strukturą ładunku. Dla przykładu całkowity ładunek α -chymotrypsyny w warunkach zbliżonych do fizjologicznych jest bliski zeru (punkt izoelektryczny) natomiast posiada ona znaczny moment dipolowy 480 D, którego wielkość nie zależy od siły jonowej roztworu w zakresie 2-12 mM i słabo zależy od pH. Rozmiar protein (lub nanocząstek) w zakresie kilku nanometrów powoduje, że jest on porównywalny lub mniejszy niż długość Debye'a w wodnych roztworach elektrolitów. W tych warunkach do opisu oddziaływań nie można stosować metod przybliżonych, a jedynie pełne rozwiązanie równania Poissona-Boltzmann. Celem prac wykonanych w roku 2011 było zastosowanie algorytmów numerycznych opartych na metodzie elementów skończonych dla obliczenia oddziaływań w układzie nanocząstka-powierzchnia oraz bardziej złożonego zagadnienia oddziaływania dwu i trzech nanocząstek charakteryzujących się dipolowym rozkładem ładunku przy naładowanej powierzchni.

Przykładowe rozwiązania dla rozkładu potencjału elektrycznego wokół osadzonych cząstek uzyskane metodą elementów skończonych przy pomocy programu COMSOL ilustruje Rysunek 1.



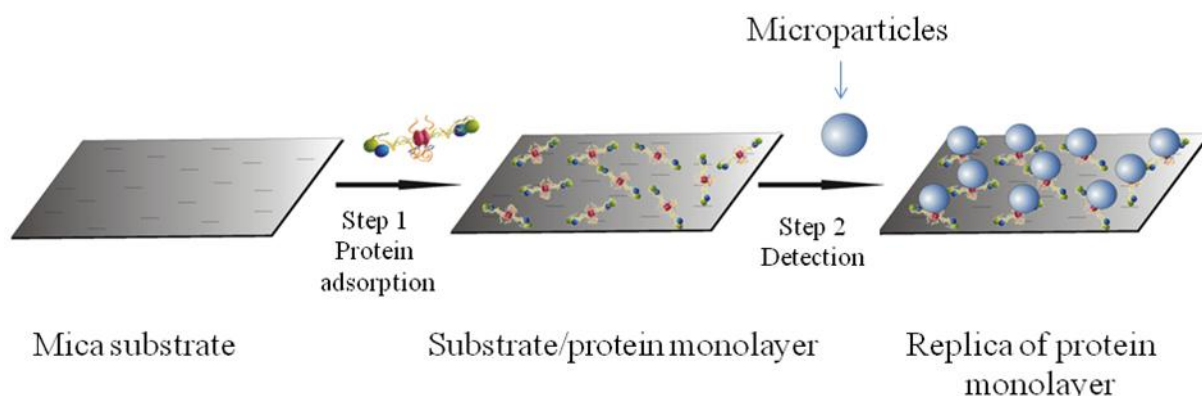
Rys. 1. Przykładowy rozkład potencjału elektrycznego dla dwu cząstek o dipolowym rozkładzie ładunku w pobliżu naładowanej powierzchni w orientacji równoległej i antyrównoległej

Stwierdzono, że obecność naładowanej powierzchni silnie wpływa na wielkość oddziaływań lateralnych w przypadku zawiesin niewodnych, gdy grubość podwójnej warstwy elektrycznej jest porównywalna lub większa niż rozmiar cząstek. Obliczyliśmy zależność sił oddziaływania od wzajemnej orientacji cząstek o dipolowym rozkładzie ładunku powierzchniowego. Wyniki obliczeń pozwoliły na interpretację literaturowych danych doświadczalnych dotyczących adsorpcji i desorpcji α -chymotrypsyny na powierzchni miki, które można wyjaśnić na podstawie zależności energii oddziaływania elektrycznego proteiny z dipolowym rozkładem ładunku i jednorodnie naładowanej powierzchni. Otrzymane wyniki mogą stanowić podstawę teoretyczną dla wytwarzania warstw nanocząstek lub protein na powierzchniach o regulowanej gęstości ładunku.

4.2. Opracowanie podstaw fizykochemicznych metody wzmocnienia koloidalnego do wyznaczania monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe

(prof. dr hab. inż. Zbigniew Adameczyk, dr Małgorzata Nattich-Rak, mgr Marta Sadowska, mgr Monika Wasilewska, dr Jakub Barbasz, dr Anna Bratek-Skicki)

Opracowano efektywną metodykę detekcji monowarstw białek na stałych powierzchniach międzyfazowych. Metoda ta opiera się na niespecyficznych (elektrostatycznych) lub specyficznych (wiązania kowalencyjne) oddziaływaniach nośników koloidalnych (lateksów polistyrenowych) z białkami, tworzącymi warstewki powierzchniowe. Wskutek adsorpcji, lub chemisorpcji (w przypadku funkcjonalizowanych nośników) cząstek koloidalnych o określonej wielkości i ładunku powierzchniowym, pojawia się intensywny sygnał optyczny lub fluorescencyjny, który można w łatwy sposób analizować mikroskopowo. Przy pomocy tej metody, przedstawionej schematycznie na Rys. 1, można w sposób ilościowy określić pokrycie powierzchniowe białka, a także znak i rozkład ładunku powierzchniowego i potencjału zeta monowarstw białek w funkcji pH. Pozwala to z kolei na wyznaczenie punktu izoelektrycznego, co jest utrudnione przy użyciu metod objętościowych, np. elektroforetycznych wskutek agregacji białek. Znając pokrycie powierzchniowe można wyznaczyć z kolei stężenie objętościowe białek. Czułość tej metody jest wysoka, umożliwiając efektywną detekcję białek w objętości już dla stężeń ok. 0,01 ppm (10 ppb), co przewyższa o rzędy wielkości dotychczas stosowane metody spektrofotometryczne. W celu określenia efektywności metody wzmocnienia koloidalnego przeprowadzono pomiary kalibracyjne dla monowarstw fibrynogenu na powierzchni miki, na które osadzano w warunkach kontrolowanego transportu dyfuzyjnego cząstki ujemnego lateksu polistyrenowego o rozmiarach 800 nm. Wykazano, że pokrycie lateksu wzrasta gwałtownie ze wzrostem pokrycia fibrynogenu, osiągając 0,8 wartości maksymalnej dla danych warunków, dla pokrycia fibrynogenu $\Theta_f=0,05$ (5%). Uzyskane wyniki doświadczalne interpretowano ilościowo rozwiniętą w ramach niniejszych badań teorią fluktuacji. Wykazano, że efektywne osadzanie cząstek lateksu zachodzi na centrach adsorpcji złożonych z dwóch blisko siebie położonych cząsteczek fibrynogenu. Ponadto wykazano, że często stosowana, klasyczna teoria DLVO nie stosuje się w tym przypadku, ze względu na heterogeniczność rozkładu ładunku elektrycznego. Uzyskane wyniki mają więc istotne znaczenie poznawcze i praktyczne.



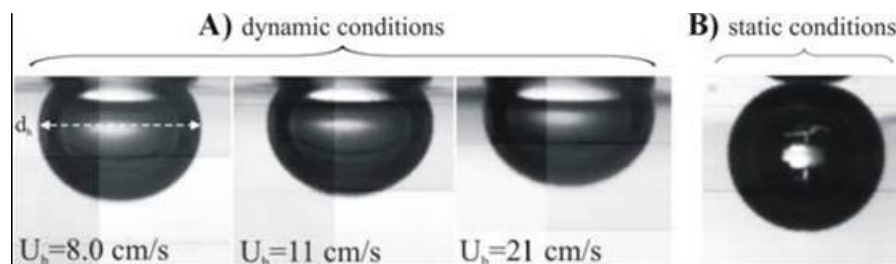
Rys. 1. Schemat metody wzmocnienia koloidalnego

4.3. Określenie wpływu rozmiarów filmu ciekłego na czas koalescencji pęcherzyków na granicy faz ciecz/gaz

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

Badania mają na celu określenie mechanizmu i najistotniejszych czynników decydujących o przebiegu kolizji pęcherzyków z powierzchnią ciecz/gaz (odbicie lub koalescencja). Badano wpływ prędkości pęcherzyków w momencie kolizji oraz rozmiarów powstających filmów ciekłych na odbicia i/lub koalescencję pęcherzyków na powierzchni wody destylowanej. Prędkość pęcherzyków w momencie kolizji z powierzchnią woda/powietrze modyfikowano 2 metodami, a mianowicie: i) poprzez zmianę średnicy pęcherzyka (prędkości graniczne wypływających pęcherzyków zależą od ich średnicy), oraz ii) poprzez zmianę położenia powierzchni międzyfazowej względem kapilary, na której wytwarzano pęcherzyki (prędkość pęcherzyka bezpośrednio po jego oderwaniu od kapilary, tj. na etapie przyspieszania, zależy od odległości).

Wykazano, że czas koalescencji pęcherzyków, tj. całkowity czas od momentu pierwszej kolizji do rozerwania pęcherzyka na powierzchni wody, wzrastał z prędkością kolizji pęcherzyków. Zmiana prędkości pęcherzyków w momencie kolizji od 8 do 36,7 cm/s powodowała, że czas koalescencji pęcherzyków na swobodnej powierzchni wody destylowanej wydłużał się od kilku do 120 ms, Prędkość pęcherzyka w momencie kolizji wpływa bardzo istotnie rozmiary cienkiego filmu wody oddzielającego pęcherzyk od fazy gazowej i determinuje także prawdopodobieństwo odbicia pęcherzyka od powierzchni wody. Na rysunku przedstawiono zdjęcia pęcherzyka w momencie kolizji z powierzchnią wody przy różnych prędkościach. Jak widać średnica pozioma kolidującego pęcherzyka, która



Rys. 1. Zdjęcia pęcherzyka o promieniu $R_b=0.74$ mm; A) - w momencie kolizji z różnymi prędkościami z powierzchnią międzyfazowa woda/powietrze, B) – unieruchomionego pod płytką miki

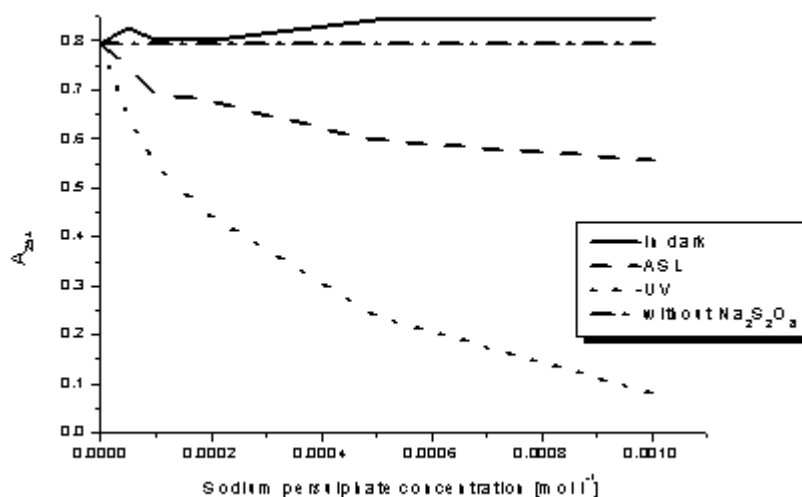
determinuje średnice powstającego filmu ciekłego, wzrasta z prędkością kolizji i jest znacznie większa w warunkach dynamicznych niż statycznych. A zatem większa prędkość kolizji oznacza, że powstający film ciekły będzie miał większą średnicę. Koalescencja (pęknięcie) pęcherzyka zachodzi, jeżeli w czasie kolizji zostanie przerwany film ciekły oddzielający pęcherzyk od fazy gazowej. Większa średnica powstającego filmu ciekłego oznacza dłuższy czas synerezy filmu do jego krytycznej grubości rozrywu. Kiedy czas synerezy filmu jest dłuższy od czasu kolizji (ok. 5 ms), wtedy następuje odbicie pęcherzyka od powierzchni wody. Wskutek dyssypacji energii ruchu pęcherzyka, jego drugie i ewentualne kolejne zderzenia z powierzchnią międzyfazową zachodzą z coraz mniejszą prędkością, co oznacza mniejsze rozmiary i szybsze wycieknięcie powstającego filmu ciekłego. Stwierdzono, że rozerwanie filmu ciekłego następowało przy kolizjach, przy których promień powstającego filmu ciekłego $R_F < 0.28$ mm.

5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe

5.1. Efekty synergiczne w procesach fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza

(prof. dr hab. in.ż Piotr Warszyński, dr hab. Paweł Nowa prof. IKiFP PAN, mgr Justyna Dziedzic)

Celem badań prowadzonych w roku 2011 było określenie wpływu dodatku utleniacza ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$ i H_2O_2) na proces fotokatalitycznego rozkładu związków modelowych - kwasów humusowych w obecności zawiesiny TiO_2 w roztworze. Główny nacisk położony został na uzyskanie synergicznego efektu pomiędzy kilkoma metodami, który w konsekwencji ma doprowadzić do poprawy efektywności usuwania naturalnych substancji organicznych (NSO) z wód. Zaobserwowano, iż dodatek utleniaczy w procesie fotokatalitycznym znacząco poprawia efektywność rozkładu substancji humusowych w porównaniu z procesem w obecności tylko samego katalizatora. Badano enkapsulację nadsiarczanu sodu w kapsułkach woskowych, krzemionkowych, dodatkowo modyfikowanych polielektrolitami, szybkość jego uwalniania, a także wpływ nadsiarczanu uwolnionego z kapsułek na przebieg procesu fotokatalitycznego utleniania kwasów humusowych. Detekcję rozkładu kwasów humusowych prowadzono przy zastosowaniu spektrofotometrii z zakresu UV – VIS (analityczna długość fali - 254 nm) oraz dodatkowo porównując z parametrem ChZT-Mn.



Rys. 1 Fotokatalityczny rozkład kwasu humusowego ($40 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}$) w zawieszynie $100 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}$ TiO_2 (czas naświetlania - 60 min) i dodatkiem nadsiarczanu sodu; intensywność promieniowania UV: $48.8 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2}$, intensywność promieniowania VIS: $68.8 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2}$

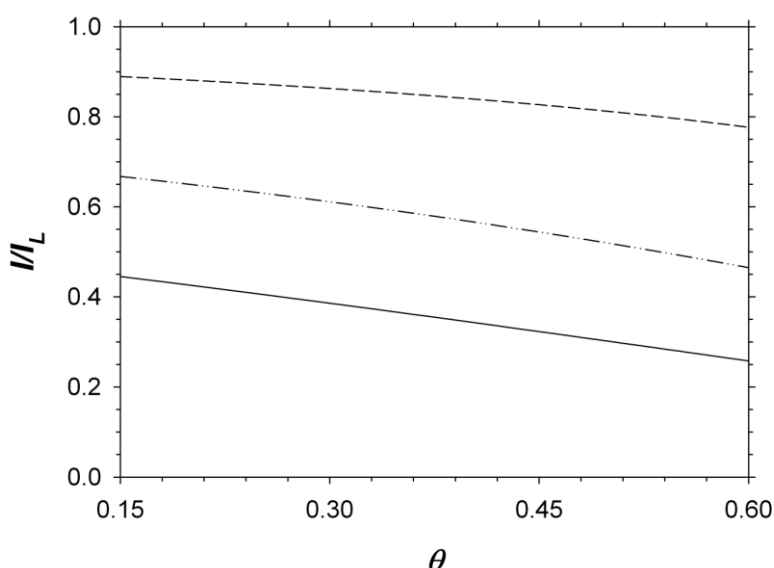
Zaobserwowano wysoką skuteczność TiO_2 w procesie fotokatalitycznym (ok. 50% konwersja kwasów humusowych po 60 min naświetlania UV przy odpowiednio wysokiej dawce katalizatora). Jednakże poprzez równoczesne zastosowanie katalizatora i czynnika utleniającego – nadsiarczanu sodu nastąpiła intensyfikacja procesu fotokatalitycznego (ok. 90% konwersja kwasów humusowych po 60 min naświetlania UV przy zastosowaniu stężenia $1 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{l}^{-1}$). Stwierdzono występowanie efektu synergicznego w przypadku równoczesnego stosowania TiO_2 i $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$. Podobnie efekt synergiczny zaobserwowana w przypadku użycia enkapsulowanego utleniacza.

5.2. Modelowanie adsorpcji nanocząstek – wieloskalowy opis teoretyczny kinetyki adsorpcji cząstek kulistych na powierzchni jednorodnej

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

Wyprowadzono równanie na graniczny prąd dyfuzyjny dla wirującej elektrody dyskowej (RDE) pokrytej warstwą cząstek. W tym celu skorzystano z modelu zaproponowanego przez Gough'a and Leyboldt'a w 1979 dla RDE pokrytej homogeniczną membraną żelową. Zaproponowali oni równanie na graniczny prąd dyfuzyjny dla RDE z membraną, korzystając z równania Levich'a oraz zakładając brak konwekcyjnego przepływu w membranie. W badanym przez nas układzie RDE została pokryta warstwą kulistych cząstek. Korzystając z faktu, że przepływ przez ośrodek porowaty staje się zaniedbywalny, gdy ułamek objętościowy fazy stałej jest większy niż 0.1; możemy zaniedbać przepływ konwekcyjny w warstwie cząstek o pokryciu powierzchni $\theta > 0.15$. Efektywny współczynnik dyfuzji dla ośrodka porowatego zależy od porowatości i krętości. Dla warstwy cząstek o prostej geometrii sferycznej możemy obliczyć krętość metodą zaproponowaną przez Lanfrey'a et al., jako średni stosunek długości rzeczywistej drogi i prostoliniowego toru transportowanej molekuly.

Na rysunku poniżej przedstawiono wyniki otrzymane z obliczeń na podstawie równania na graniczny prąd dyfuzyjny dla RDE z zaadsorbowaną warstwą cząstek. Na wykresie został przedstawiony graniczny prąd dyfuzyjny I , znormalizowany przez prąd Levich'a I_L , w funkcji θ . Krzywe odpowiadają stosunkowi grubości zaadsorbowanej warstwy do grubości granicznej warstwy dyfuzyjnej równemu $\eta=0.1, 0.4$ i 1.0 (z góry na dół). Wartość granicznego prądu dyfuzyjnego maleje wraz ze wzrostem pokrycia powierzchni, gdy maleje porowatość warstwy, a w konsekwencji efektywny współczynnik dyfuzji. Efekt ten jest silniejszy przy wysokich obrotach dysku, gdy grubość warstwy dyfuzyjnej staje się porównywalna z grubością warstwy zaadsorbowanych cząstek. Jednak nawet dla stosunkowo cienkich warstw, gdy $\eta=0.1$, wartość granicznego prądu dyfuzyjnego maleje o ponad 10%.



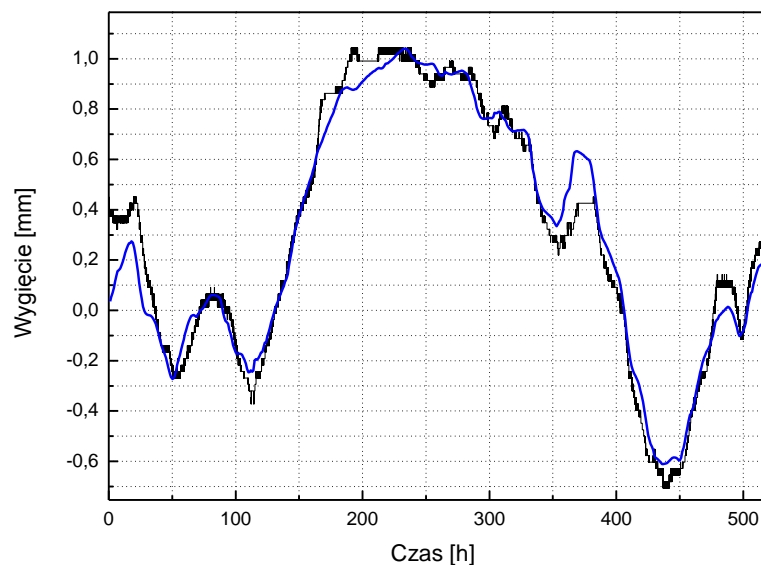
Otrzymano dobrą zgodność teoretycznie wyznaczonego granicznego prądu dyfuzyjnego z wynikami eksperymentalnymi dla średnich i wysokich pokryć powierzchni wirującej elektrody dyskowej.

6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

6.1. Modelowanie odpowiedzi polichromowanych zabytkowych obiektów drewnianych na zmiany warunków środowiska w ich otoczeniu

(prof. dr hab. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, dr Michał Łukomski, mgr Bartosz Rachwał)

Zrealizowane zadania badawcze miało na celu uściślenie analizy metodą elementów skończonych (FEA) w jej zastosowaniu do modelowania dyfuzji pary wodnej, odkształceń i naprężeń w wielowarstwowej strukturze polichromowanego drewna w odpowiedzi na zmienne warunki klimatu otoczenia. Chodziło o dokładne odtworzenie przy użyciu FEA odpowiedzi obiektów zabytkowych w czasie rzeczywistym. Jako obiekt standardowy przyjęto prostą deskę lipową o grubości 10 mm pokrytą warstwą zaprawy malarskiej o grubości 1 mm. We wcześniejszych badaniach określono współczynniki dyfuzji pary wodnej, współczynniki emisji powierzchniowej, izotermę sorpcji pary wodnej i zmiany wymiarowej, oraz właściwości mechaniczne drewna i zaprawy. Przygotowano modelową deskę pokrytą zaprawą według takiej samej specyfikacji i wystawiono w jednej z galerii Muzeum Narodowego w Krakowie. Jej odpowiedź strukturalna na rzeczywiste wahania klimatu - wyrażoną jako wygięcie - monitorowano przez jeden rok. Uzyskano bardzo dobrą zgodność wartości zmierzonych i obliczonych po starannym parametrycznym uściśleniu modelu, co pokazuje Rysunek 1.



Rysunek 1 Wygięcie swobodnej deski pokrytej warstwą zaprawy malarskiej obliczone przy użyciu uściślonego modelu FEA (krzywa niebieska) i zmierzone w galerii Muzeum Narodowego w Krakowie (krzywa czarna).
Pomiary przeprowadzono w okresie rozpoczynającym się 15 lipca 2010

Poddano optymalizacji następujące parametry w celu uzyskania zgodności pomiędzy wartościami obserwowanymi a obliczonymi: grubość warstwy zaprawy w celu odzwierciedlenia niejednorodnego rozmieszczenia zaprawy w obiektach rzeczywistych, wyliczenie pośredniej izotermę pęcznienia będącej wynikiem histerezy odpowiedzi wymiarowej drewna poddawanego przemiennym procesom adsorpcji i desorpcji, oraz stycznej orientacji drewna w środku deski, również odzwierciedlającej anatomie obiektów rzeczywistych.

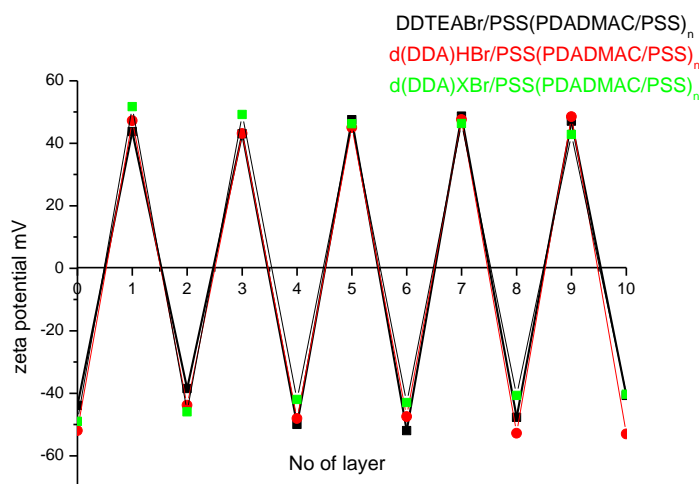
PROJEKTY BADAWCZE WŁASNE

1. 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)

Oddziaływania przeciwnie naładowanych surfaktantów i polielektrolitów prowadzą zwykle do powstawania kompleksów surfactant – polielektrolit. W zależności od właściwości par surfaktantów i polielektrolitów i stosunku ich stężeń, kompleksy te mogą być zastosowane jako powłoki dla kapsułkowania aktywnych czynników. Celem pracy w roku 2011 było określenie właściwości układów surfaktant-polielektrolit na granicy faz ciecz-gaz i ciecz–ciecz i opracowanie metody otrzymywania nanokapsulek opartej na enkapsulacji kompleksu surfaktant-polielektrolit poprzez sekwencyjną adsorpcję przeciwnie naładowanych polielektrolitów. Do formowania kompleksów zastosowano surfaktanty kationowe: bromki (N dodecylo N,N,N trialkilo amoniowe (DDTEABr) i bromki N,N,N',N'-tetrametylo-N,N'-di(ndodecylo)-alkyleno-diamoniowe (d(DDA)HBr) oraz przeciwnie naładowany polianion: PSS sulfonian poli(sodowo-4-styrenowy). Otrzymane ujemnie naładowane kompleksy, następnie pokrywano polielektrolitami polikationem PDADMAC (chlorkiem polidialylo dimetylo amoniowym) oraz polianionem PSS na drodze adsorpcji metodą warstwa na warstwę. Aby otrzymać stabilne kapsułki zastosowano odpowiednie proporcje stężeń surfaktantu i polielektrolitu. Otrzymane nanokapsułki charakteryzowano poprzez pomiar wielkości metodą dynamicznego rozpraszania światła (DLS) i pomiar potencjału zeta (ζ). Otrzymany rozmiar kapsulek mieścił się w granicach 80-100 nm. Aby potwierdzić możliwość enkapsulacji hydrofobowych pochodnych solubilizowano wewnątrz kapsulek kumarynę 6. Rysunek 1 ilustruje typową zależność potencjału zeta otrzymanych kapsulek w zależności od adsorpcji warstw: PDADMAC i PSS.



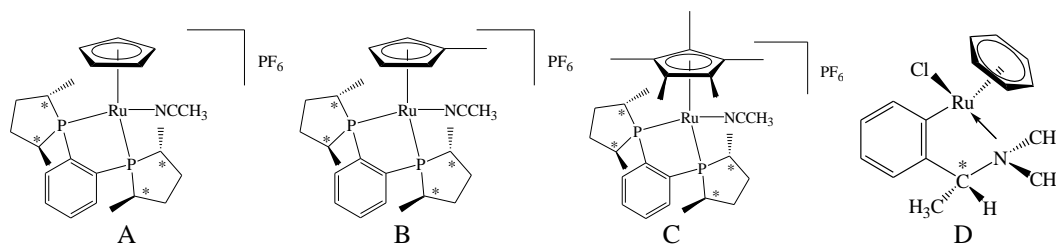
Rys.1. Zmiana potencjału zeta powłoki pokrytej polielektrolitem w zależności od ilości warstw PDADMAC/PSS dla układów: DDTEABr /PSS(PDADMAC/PSS) - (linie ciągłe), d(DDA)HBr/PSS(PDADMAC/PSS) - (linie przerywane) i d(DDA)XBr/PSS(PDADMAC/PSS) - (linie zielone)

2. Badanie heterogenizowanych chiralnych kompleksów rutenu w katalitycznym enencjoselektywnym uwodornieniu ketonów

Projekt badawczy N N204 2490 34 [2008-2011]

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

W toku realizacji projektu zsyntetyzowano trzy nowe związki kompleksowe rutenu zawierające chiralną fosfinę DuPhos (Rys. 1A-C) i jeden związek rutenu z chiralną aminą TMBA (Rys. 1D).



Rys. 1. Struktury zsyntetyzowanych kompleksów rutenu

Związki te zostały scharakteryzowane przy pomocy spektroskopii NMR (^1H , $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$, $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$), IR, UV-Vis a w przypadku kompleksów A i C otrzymano odpowiedniej jakości kryształy, na podstawie których określono ich struktury krystalograficzne. Ponadto, związki te odznaczają się stabilnością w kontakcie z powietrzem jak i w roztworach, co pozwala na pracę z tymi kompleksami bez konieczności stosowania linii Schlenka. Związki A-C osadzono na aluminiowanych sitach molekularnych typu HMS(Si/Al=20) metodą wymiany jonowej na skutek oddziaływania pomiędzy kationami kompleksów Ru a ujemnie naładowanymi centrami nośnika utworzonymi na skutek podstawienia jonów Si^{4+} przez Al^{3+} . Innym stosowanym nośnikiem kompleksów A-C była żywica metakrylanowo-styrenowa zawierająca grupy funkcyjne COOH, w przypadku, której wymiana jonowa odbywa się pomiędzy ww. kationami Ru a grupami COOH. Obojętny związek kompleksowy D "unieruchamiano" na nośniku typu Al_2O_3 metodą "mokrej" impregnacji. Osadzanie kompleksów organometalicznych na stałych nośnikach, tzw. "heterogenizacja", ma na celu połączenie wysokiej aktywności katalitycznej związków organometalicznych z typowymi zaletami katalizatorów heterogenicznych, tj. łatwością ich oddzielenia z mieszaniny reakcyjnej oraz możliwością ponownego użycia. Katalizatory osadzone na nośnikach charakteryzowano metodami BET, skaningowej i wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej (SEM i HRTEM), spektroskopii w zakresie ultrafioletu i widzialnym (UV-Vis), spektroskopii FTIR, dyfrakcji promieniowania X (XRD) oraz NMR ciała stałego (^{27}Al , ^{29}Si). Przygotowane katalizatory testowano w reakcji katalitycznego uwodornienia ketonów do alkoholi drugorzędowych na przykładzie acetofenonu i acetolu (używanego do produkcji leku Tavanic). Reakcje katalityczne prowadzono w różnych warunkach ciśnienia (maks. 50 barów) i temperatury (do 70°C); jako rozpuszczalnika użyto metanolu. Metanol w odróżnieniu od innych rozpuszczalników (THF, 2-propanol) nie powoduje ciemnienia roztworu (=rozkładu katalizatorów z chiralną fosfiną DuPhos). Przygotowane przez nas katalizatory (zawierające chiralną fosfinę DuPhos jak i chiralną aminę TMBA) niestety nie wykazują aktywności katalitycznej w reakcji uwodornienia acetofenonu i acetolu w zastosowanych przez nas warunkach. Po 6 godzinach reakcji, analiza GC wykazuje obecność tylko i wyłącznie substratów w mieszaninie reakcyjnej.

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

Projekt badawczy N N202 248535 [2008-2011]

(kierownik projektu: dr Jacek Gurgul)

Równoległe do badań układów opartych na interfejsie Fe/CoO podjęto tematykę oddziaływań wymiennych w układzie Fe/MnO. W pierwszym etapie badań wykonano szereg syntez epitaksjalnych warstw MnO na polerowanym i łupanym MgO(100) przy użyciu MBE. Przy użyciu spektroskopii fotoelektronów (XPS), spektroskopii Augera (AES) oraz LEED wykonano szczegółową charakteryzację fizykochemiczną na poszczególnych etapach procesu wytwarzania i modyfikowania warstw. Zastosowane procedury pozwoliły na uzyskanie epitaksjalnych warstw metalicznego manganu i żelaza, stopów Mn_xFe_{1-x} oraz tlenków MnO i $Mn_xFe_{1-x}O$. Wybrane układy zostały scharakteryzowane pod względem właściwości magnetycznych. Okazało się, że warstwowy układ Fe/MnO wykazuje w niskich temperaturach efekt „exchange-bias” w przeciwieństwie do utlenionego $Mn_xFe_{1-x}O$.

Jednocześnie z badaniem układów metal/tlenek na podłożach nie-polarnych przystąpiono do eksperymentów mających na celu uzyskanie układów z oddziaływaniem wymiennym typu "exchange-bias" na podłożach polarnych. Problematyka warstw na podłożach polarnych jest nietrywialna z uwagi na relatywne trudności związane ze stabilizacją tych powierzchni, ale z drugiej strony niesłychanie ciekawa dzięki niezwykłym stanom elektronowym formującym się na takich powierzchniach. Badania powierzchni polarnych były prowadzone dwutorowo. Z jednej strony prowadzono próby z monokryształami metalicznymi W(110) i Pt(111), a z drugiej wykorzystano jako podłoże tlenek MgO(111). Pierwsze eksperymenty z W(110), który może być wykorzystany jako podłoże do uzyskania dobrze zdefiniowanych i gładkich warstw buforowych Ag(111) pod osadzanie Fe(111), FeO(111) oraz CoO(111) nie przyniosły sukcesu, więc skoncentrowano się nad pracami dotyczącymi uzyskania epitaksjalnych warstw FeO(111) na podłożach Pt(111) oraz MgO(111). W obu przypadkach udało się uzyskać cienkowarstwowy tlenek FeO(111) (16 ML na MgO(111) i 17 ML na Pt(111)) wykorzystując utlenianie kolejno nakładanych monowarstw Fe. Potwierdzenie struktury oraz zbadanie właściwości elektronowych i magnetycznych otrzymanych warstw uzyskano przy użyciu dyfrakcji LEED, spektroskopii AES i CEMS oraz pomiarów VSM i nieelastycznego rozpraszania neutronów INS. Otrzymane wyniki okazały się niesłychanie interesujące gdyż przeprowadzone badania pokazały zasadniczą różnicę pomiędzy właściwościami fizykochemicznymi FeO(111) osadzonego na obu podłożach.

Kontynuując pracę z podłożem MgO(111) przygotowano także układ Fe/CoO(111), w którym pomiary VSM pokazały, że w niskich temperaturach pole "exchange-bias" H_{EB} jest ponad 10-krotnie większe niż H_{EB} w analogicznym układzie przygotowanym na podłożu MgO(001). Wynik ten pokazuje, że układy cienkowarstwowe przygotowywane na podłożach polarnych mogą stanowić podstawę nowych materiałów, w których pożądane właściwości magnetyczne zostają silnie wzmocnione przy równoczesnym braku zmiany pozostałych cech.

4. Molekularne mechanizmy determinujące specyficzność enzymów zależnych od 2-oksoglutatanu

Projekt badawczy N N301 093036 [2009-2011]

(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)

W ramach tego projektu, którego realizacja rozpoczęła się w kwietniu 2009, przewidziane było przebadanie dwóch grup enzymów zależnych od 2-oksoglutatanu (2OG): halogenaz na przykładzie SyrB2 oraz demetylaz białek histonowych JMJD2. Białka te w swoich centrach aktywnych wiążą jon Fe^{2+} i wykorzystują różnicę potencjału red-ox 2OG i O_2 do przeprowadzenia utleniającej transformacji swoich zasadniczych substratów. Reakcje te to: demetylacja grup lizynowych na N-końcowym fragmencie białka histonowego H3 w przypadku JMJD2, oraz chlorowanie łańcucha bocznego treoniny dla SyrB2. Procesy te mają bardzo duże znaczenie w przyrodzie, gdyż uczestniczą w kontroli ekspresji genów (demetylasy) oraz biosyntezie antybiotyków (SyrB2).

Ważnym zagadnieniem było określenie poziomu metylacji grup lizynowych w białkach histonowych jako jednego ze znaczników epigenetycznych, kontrolowanego przez współdziałanie grup enzymów odpowiedzialnych za przyłączanie i usuwanie grup metylowych. Rodzina demetylaz JMJD2 specjalizuje się w usuwaniu grup metylowych z lizyny 9 i 36 w białku histonowym H3. Poszczególne enzymy z tej rodziny różnią się szerokością spektrum substratowego, i tak, JMJD2A demetyluje tri- i dimetylowe pochodne H3-K9, a JMJD2D, różniący się od JMJD2A tylko dwoma aminokwasami w pobliżu miejsca aktywnego, jest skuteczny również względem monometylowej pochodnej H3-K9.

W celu identyfikacji czynników odpowiedzialnych za poszerzenie spektrum substratowego przy przejściu z JMJD2A do JMJD2D (podwójna mutacja: S288A, T289I) przeprowadzono symulacje klasycznej dynamiki molekularnej dla kompleksów enzymy- Fe^{2+} -2OG-(fragment H3-K9 z monometylowaną K9). Parametry pola siłowego amber03 dla kofaktora żelazowego wyznaczono z obliczeń częstości harmoniczych na poziomie B3LYP/lacvp dla modelu tegoż kofaktora. Dla 2OG użyto pola siłowego GAFF, w pełni kompatybilnego z polem amber03. Po wstępnym równowagowaniu układów w warunkach stałej objętości (rozgrzewanie układu do 300 K) i stałym ciśnieniu (ustabilizowanie gęstości układu), symulacje przeprowadzono dla czasu 20 ns, zbierając struktury pośrednie co 1 ps. Analiza otrzymanych trajektorii układów pokazała, że wpływ podwójnej mutacji na strukturę miejsca aktywnego jest subtelny, lecz zauważalny. Na szczególną uwagę zasługuje analiza wiązań wodorowych z udziałem grupy aminowej lizyny K9 oraz 2-oksoglutatanu. Niewielkie rozluźnienie struktury białka spowodowane mutacją (mutacja eliminuje 2 wiązania wodorowe: Ser288 --- Ile197, Thr289 --- Thr173) sprawia, że częstość występowania wiązania wodorowego między grupą NH_2 z lizyny K9 z tlenem z grupy bocznej Asn290 wzrasta z 57 do 65%. Tleny grupy karboksylowej 2OG, grupy, która przekształcana jest w CO_2 w czasie aktywacji tlenu, zmieniają preferencję w tworzeniu wiązania wodorowego z grupą OH z łańcucha bocznego Ser196: tlen związany z Fe w formie natywnej tworzy w 43.9% takie wiązanie, a w podwójnym mutancie w 58.0% struktur takie wiązanie jest obserwowane. Efekty te, chociaż subtelne i wymagające jeszcze potwierdzenia w dodatkowych symulacjach, mogą mieć znaczenie dla energetyki aktywacji tlenu, to jest kluczowego etapu reakcji katalitycznej. Wyniki te pozwoliły sformułować wstępną hipotezę, że badane mutacje mogą mieć istotny wpływ na etap tworzenia aktywnej formy oxoferrylowej w zależności od substratu, a więc wnosić wkład do selektywności badanego typu enzymów.

5. Opracowanie metody tworzenia biologicznie aktywnych multiwarstw zawierających polielektrolity-białka-dendrymery

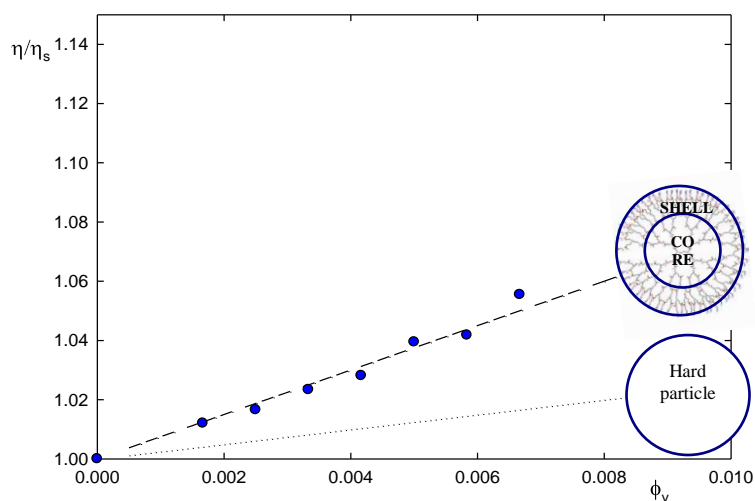
Projekt badawczy N N204 028536 [2009-2012]

(kierownik projektu: dr Barbara Jachimska)

Charakterystyka dendrymerów poli (amido aminy) 6-tej generacji (PAMAM) w roztworze wodnym została przeprowadzona przez pomiar ich ruchliwości elektroforetycznej oraz współczynnika dyfuzji przy użyciu dynamicznego rozpraszania światła (DLS). Pozwoliło to na określenie hydrodynamicznego promienia cząsteczki PAMAM oraz ich efektywnego ładunku. Te właściwości fizykochemiczne zostały uzupełnione przez pomiar lepkości dynamicznej. Na podstawie tych pomiarów udało się interpretować ich strukturę jako core/shell jak postulowano w literaturze przedmiotu. Pomiar ruchu elektroforetycznej posłużyły nie tylko do wyznaczenia efektywnego stopnia jonizacji dendrymeru PAMAM, ale również do obliczenia potencjału zeta oraz punktu izoelektrycznego tego polimeru (pH=9,9). Efektywny ładunek okazał się znacznie mniejszy niż teoretyczna wartość obliczona na podstawie jego struktury.

Badania adsorpcji dendrymerów PAMAM na powierzchniach modelowych przeprowadzono za pomocą mikroskopu sił atomowych (AFM) oraz mikrowagi kwarcowej (QCM). Skorelowanie stopnia jonizacji dendrymerów z własnościami monowarstw dendrymerów otrzymane z zastosowaniem mikrowagi kwarcowej QCM pozwoliły zdobyć informacje na temat mechanizmu odwracalnego pęcznienia struktury dendrymeru PAMAM. Pomiar te wyraźnie wskazują na istotną rolę pH oraz siły jonowej na konformację struktury cząsteczki dendrymeru spowodowaną zmianą stopnia jonizacji grup aminowych.

Własności te mogą stanowić ważny aspekt aplikacyjny tych polimerów jako potencjalnych nośników leków. Uwalnianie leków może być sterowane zmianą konformacji cząsteczki przez czynniki zewnętrzne takie jak pH lub siła jonowa roztworu.



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

Projekt badawczy N N507 269936 [2009-2012]

(kierownik projektu: dr inż. Aleksandra Pacuła)

1. Wykonano dwie serie syntez kompozytów węglowo-tlenkowych metodą CVD (chemical vapour deposition). Eksperymenty CVD przeprowadzono w poziomym piecu rurowym. Preparatyka kompozytów polegała na ogrzewaniu materiałów o strukturze hydrotalkitu przez 30 minut w przepływie argonu nasyconego parami acetonitrylu (CH_3CN). Pierwszą serię syntez prowadzono w temperaturach 600, 700, 800°C i z wykorzystaniem materiałów o strukturze hydrotalkitu zawierających w swoim składzie takie pierwiastki metaliczne, jak Co i Al lub Ni i Al ($\text{Co/Al}=3$, $\text{Ni/Al}=3$). Natomiast drugą serię syntez prowadzono w dwóch temperaturach 600 i 700°C i z wykorzystaniem kobaltowo-niklowo-glinowych materiałów o strukturze hydrotalkitu i różnym stosunkiem atomowym kationów dwu i trójwartościowych wynoszącym 2 i 3 oraz różnym stosunkiem atomowym kobaltu do niklu wynoszącym 3:7, 5:5, 7:3.
2. W wyniku traktowania kompozytów kwasem nieorganicznym otrzymano materiały węglowe. W procesie usuwania składnika niewęglowego z kompozytów zastosowano stężony kwas solny. Proces roztwarzania prowadzono przez 24 godziny wspomagając operację działaniem ultradźwięków (30 minut).
3. W celu określenia składu fazowego, struktury, morfologii oraz powierzchni właściwej kompozytów i materiałów węglowych przeprowadzono charakterystykę fizykochemiczną próbek proszkowych za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD), analizy termicznej (TG), spektroskopii fotoelektronów (XPS), skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM) oraz fizycznej sorpcji azotu.
4. Przeprowadzono charakterystykę właściwości elektrodowych otrzymanych materiałów za pomocą voltamperometrii cyklicznej w środowisku alkalicznym. Zmierzono pojemność podwójnej warstwy elektrycznej próbek i sprawdzono ich aktywność elektrokatalityczną w reakcji redukcji tlenu i w reakcji utleniania metanolu.
5. Głównym (60-67%) składnikiem kompozytów otrzymanych z udziałem kobaltowo-glinowego prekursora o strukturze hydrotalkitu ($\text{Co/Al}=3$) był materiał niewęglowy, który stanowiły Co, CoO, CoAl_2O_4 oraz Al_2O_3 . Pozostałą część (33-40%) składu kompozytów stanowił depozyt węglowy, w tym głównie nanorurki węglowe. Podobnie w przypadku kompozytów otrzymanych z udziałem niklowego-glinowego prekursora o strukturze hydrotalkitu ($\text{Ni/Al}=3$), których głównym (60-64%) składnikiem był również materiał niewęglowy i stanowiły go Ni, NiAl_2O_4 oraz Al_2O_3 . Pozostałą część składu (36-40%) kompozytów stanowił depozyt węglowy, w tym głównie nanorurki węglowe. Preparaty otrzymane z udziałem kobaltowo-glinowego syntetycznego hydrotalkitu były w mniejszym stopniu krystaliczne w porównaniu z preparatami otrzymanymi z niklowo-glinowego syntetycznego hydrotalkitu. Kompozyty w wyniku traktowania kwasem traciły znaczną część składnika niewęglowego, którego zawartość spadała do 16-26% dla próbki zawierającej związek kobaltu i glinu lub 16-22% dla próbki zawierającej związek niklu i glinu.
6. Przygotowano plakat "Synthesis, Characterization and Testing of Electroactive Composites Containing Cobalt Species Deposited on N-Doped Nanostructured Carbon", który zaprezentowano na 14th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis (ECASIA) w Cardiff

7. Emisja akustyczna do monitorowania obiektów muzealnych jako uniwersalna metoda prewencji konserwatorskiej

Projekt badawczy N N105 278536 [2009-2012]

(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)

Trzeci rok realizacji projektu, poświęcony był kontynuacji programu badań rozpoczętego

w drugim roku projektu. Realizowano pomiary emisji akustycznej (EA) drewna oraz materiałów sztukateryjnych podczas kontrolowanych laboratoryjnie zmian parametrów mikroklimatu w ich otoczeniu wraz z rejestracją odkształceń przy użyciu laserowej techniki pomiaru. Uzyskane rezultaty wskazały, że emisja akustyczna emitowana przy mechanicznym rozrywaniu próbek drewna oraz emisja rejestrowana podczas nagłych zmian wilgotności względnej o znacznej amplitudzie mają taki sam charakter, który jest jednakowoż inny od charakterystyki sygnałów rejestrowanych podczas niewielkich wahań wilgotności. Dowiodło to ostatecznie, że pomiar emisji jest odpowiednim miernikiem zniszczeń indukowanych przez bodźce mikroklimatyczne. Niezależnie od rodzaju próbek drewna, na których prowadzono badania, wartość amplitudy wahań wilgotności względnej powodującej powstawanie uszkodzeń w obiektach drewnianych wynosi 15-20%. Wartość ta jest zgodna z prowadzonymi symulacjami komputerowymi.

Podobnie jak to miało miejsce w roku poprzednim kontynuowano prace zmierzające do poprawy charakterystyki częstotliwościowej sygnałów emisji akustycznej i stworzenia atlasu EA. W tym celu zakupiono najbardziej płaski czujnik EA dostępny na rynku, który następnie użyto w prowadzonych badaniach próbek materiałów historycznych poddanych naprężeniom mechanicznym.

Bardzo istotnym z praktycznego punktu widzenia zadaniem było opracowanie procedury kalibracyjnej pozwalającej określić zależność między najodpowiedniejszym parametrem emisji akustycznej (energią emisji akustycznej) a makroskopowym zniszczeniem. Opracowana procedura została użyta do określenia najmniejszego ekwiwalentu zniszczenia, które może być wykryte za pomocą emisji akustycznej. W zależności od rodzaju drewna oraz jego wilgotności wartość ta waha się między 5-30 μm^2 .

Ostatnia faza projektu polega na zastosowaniu metody EA w pomiarach na rzeczywistych obiektach z kolekcji Muzeum Narodowego w Krakowie. W tym celu wybrano dwa obiekty referencyjne: XVIII-wieczną szafę z widocznymi pęknięciami spowodowanymi przez nieodpowiednie warunki klimatyczne oraz XIX-wieczny odlew gipsowy z korodującym zbrojeniem powodującym mechaniczne uszkodzanie obiektu. Pomiary te są obecnie dalej kontynuowane.

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

Projekt badawczy N N523 451336 [2009-2011]

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

Siarczki metali obecne są w środowisku jako naturalne składniki litosfery, a także na składowiskach odpadów z przemysłu wydobywczego i metalurgicznego oraz na terenach zakładów metalurgicznych, w których zaniechano produkcji. Utlenianie siarczków metali prowadzi do zanieczyszczenia środowiska jonami metali, a także do zakwaszenia środowiska (w przypadku obecności disiarczku żelaza (II), pirytu), co z kolei powoduje wtórną emisję jonów metali powodowaną ługowaniem innych minerałów powstającym kwasem siarkowym.

Przedmiotem badań było poznanie wpływu adsorpcji rozmaitych substancji powierzchniowo aktywnych na proces utleniającego roztwarzania minerałów siarczkowych i wytypowanie substancji, które mogłyby posłużyć jako inhibitory tego procesu. Badania prowadzono na próbkach naturalnych siarczków: pirytu (FeS_2), galeny (PbS) i niestechiometrycznego chalkozynu (Cu_{2-x}S), a także na próbkach syntetycznego siarczku miedzi i ołowiu. Wytypowano szereg związków, które posłużyły bądź to jako związki modelowe, bądź też stwarzały nadzieję na praktyczne zastosowanie jako inhibitory korozji siarczków. Badano następujące związki: oleinian sodu, stearynian sodu, dodecylosiarczan sodu, heksadecylosiarczan sodu, sól sodową kwasu bis(2-etyloheksylo) fosforowego, chlorek dodecylotrimetyloamoniowy, chlorek N-dodecylopirydyniowy, n-oktanol, alkohol poliwinylowy, sól sodową kwasu humusowego, 2-merkaptobenzotiazol, etyloksantogenian potasu, fosforan sodu, krzemian sodu. Adsorpcję wymienionych związków na powierzchni wytypowanych minerałów badano metodami ESCA, IR, metodami elektrochemicznymi (woltamperometria cykliczna, spektroskopia impedancyjna) oraz przez pomiar ubytku stężenia w roztworze. Wpływ adsorpcji na utleniające roztwarzanie badano prowadząc ługowanie próbek minerałów uprzednio traktowanych roztworami odczynników.

Stwierdzono, że adsorpcja fizyczna nie prowadzi do powstawania warstw adsorpcyjnych silnie związanych z powierzchnią i nie powoduje znaczącej inhibicji procesu roztwarzania siarczków. Silnie związane z powierzchnią pokrycia adsorpcyjne uzyskuje się w wyniku procesu elektrosorpcji, wysoki stopień pokrycia powierzchni uzyskuje się jednak przy stosunkowo wysokim stężeniu odczynnika. Trwałą i skuteczną inhibicję roztwarzania uzyskuje się w wyniku reakcji powierzchniowej, jeśli w wyniku tej reakcji tworzy się trudno rozpuszczalny, odporny na czynniki agresywne produkt. Przykładem może tu być oleinian sodu, który z jonami metali pochodzącymi z roztwarzania siarczków tworzy nierozpuszczalne osady (oleiniany) o właściwościach hydrofobowych. Ten właśnie związek wytypowano do badania wpływu adsorpcji na emisję jonów metali z odpadów.

Do badań wytypowano odpady reprezentatywne dla polskiego przemysłu przeróbki minerałów: osad pobrany z osadnika po byłej Kopalni Węgla Kamiennego "Gliwice", odpad pobrany ze zwałów na stawie osadowym z flotacji rud cynkowo-ołowiowych w ZGH "Bolesław" oraz osad otrzymany przez sedymentację mętów flotacyjnych pobranych wprost z ciągu technologicznego flotacji rud miedzi w KGHM ZWR Lubin. Przy użyciu atomowej spektrometrii absorpcyjnej z indukcyjnie wzbudzaną plazmą (ICP) oraz innych metod analitycznych badano skład wycieków powstających w wyniku przepuszczania wody przez odpady umieszczone w specjalnie skonstruowanych kolumnach oraz wpływ traktowania odpadów roztworem oleinianu sodu na emisję jonów metali z badanych odpadów. Przeprowadzone testy potwierdziły skuteczność tego związku jako inhibitora reakcji utleniania siarczków metali w przypadku odpadów pochodzących z ZGH "Bolesław".

9. Teoretyczna i eksperymentalna analiza porowatości wielowarstwowych kulistych cząstek koloidalnych

Projekt badawczy N N204 347737 [2009-2012]
(kierownik projektu: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN)

Przeprowadzone zostały symulacje komputerowe procesu adsorpcji cząstek koloidalnych metodą warstwa po warstwie. Wygenerowano wielowarstwowe struktury cząstek kulistych zgodnie z modelem sekwencyjnej adsorpcji przypadkowej sztywnych kul. Porównano właściwości transportowe kilku wielowarstw o tej samej średniej grubości, otrzymanych na drodze adsorpcji kolejnych warstw cząstek o różnym pokryciu powierzchni. Obliczono rozkład porowatości oraz rozkład krętości porowatych filmów. Wyznaczono również współczynnik blokowania próbnych cząstek kulistych przez warstwę w funkcji ich średnicy. Obliczono także średnią kwadratową szorstkość wielowarstw oraz zaprezentowano topografię ich powierzchni.

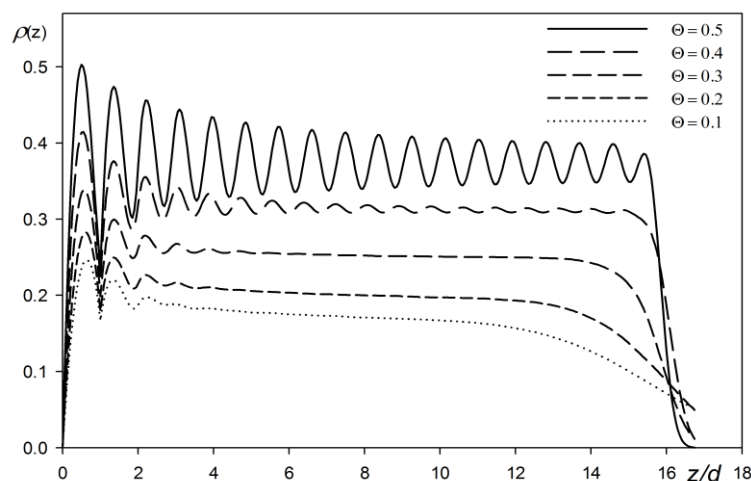
W celu otrzymania bardziej precyzyjnych informacji na temat rozkładu cząstek w każdej warstwie wyznaczono zależność ułamka objętościowego cząstek w funkcji odległości z od powierzchni adsorpcji stosując wzór:

$$\rho_i \llcorner \rceil = \frac{dv_i \llcorner \rceil}{dv} = \frac{\sum_{j=1}^N S_{ij} \llcorner \rceil}{S},$$

gdzie: N jest liczbą cząstek zaadsorbowanych w pojedynczej warstwie, S jest polem powierzchni adsorpcji, $dv_i = dz \sum_{j=1}^N S_{ij} \llcorner \rceil$ jest infinitezymalną objętością cząstek warstwy numer i w elemencie objętościowym $dv = Sdz$ (posiadającym infinitezymalną grubość dz) i $S_{ij} \llcorner \rceil$ jest polem powierzchni przekroju cząstki j z warstwy numer i na wysokości z od powierzchni adsorpcji. Sumaryczny ułamek objętościowy cząstek $\rho \llcorner \rceil$ dany jest wzorem:

$$\rho \llcorner \rceil = \sum_{i=1}^l \rho_i \llcorner \rceil$$

Poniższy wykres przedstawia sumaryczny ułamek objętościowy wielowarstw o średniej grubości równej 16 średnicom cząstek, otrzymanych z pojedynczych warstw o różnym pokryciu powierzchni Θ .



Nasze wyniki sugerują, że pokrycie powierzchni 0.3 jest optymalne do produkcji jednorodnych wielowarstw o stałej porowatości w minimalnej liczbie cykli adsorpcyjnych.

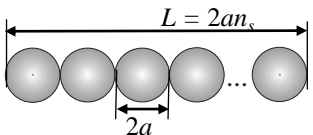
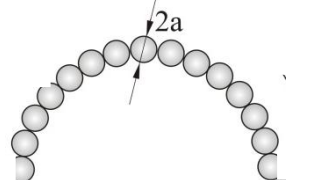
10. Nowa metoda opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych

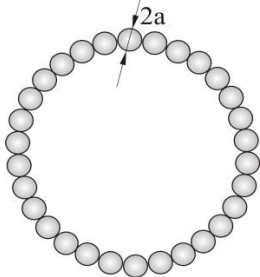
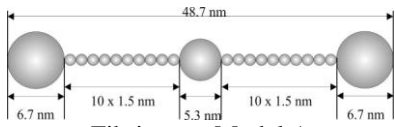
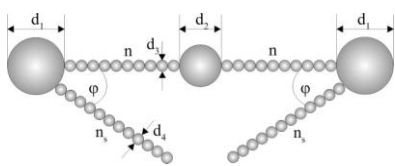
Projekt badawczy N N204 026438 [2010-2013]

(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Zbigniew Adamczyk)

Znajomość tensorów ruchliwości hydrodynamicznej oraz lepkości wewnętrznej suspensji ma istotne znaczenie dla wyznaczenia konformacji cząsteczek białek w roztworach oraz na powierzchniach międzyfazowych, a także dla opisu kinetyki ich adsorpcji wyznaczanej często przez pomiar potencjału przepływu. Ze względu na skomplikowane kształty cząsteczek białek, bezpośrednie obliczenia teoretyczne tych parametrów są praktycznie niemożliwe. Tak więc, w ramach przeprowadzonych prac rozwinięto efektywne podejście oparte na koncepcji zastąpienia realnego kształtu cząsteczki białka układem stykających się kul o różnej wielkości. Taka transformacja kształtu cząsteczki umożliwia przeprowadzenie obliczeń tensorów ruchliwości, dyfuzji oraz lepkości wewnętrznej dla różnorodnych kształtów cząsteczek. Obliczenia te były prowadzone w oparciu o liniowe równanie Stokesa, opisujące pole przepływu cieczy. Na powierzchniach stałych zastosowano warunki brzegowe w postaci braku poślizgu, zakładając równocześnie, że objętość cieczy nie jest ograniczona. Stosując formalizm sił indukowanych oraz tensor Oseena, jako funkcję Greena dla tej geometrii przepływu, równanie Stokesa zostało przekształcone w układ równań całkowych na powierzchniach kul modelujących realny kształt cząsteczki białka. Równania te były następnie transformowane do układu multipolowych harmonik sferycznych. Warto podkreślić, że w przeciwieństwie do poprzednich podejść teoretycznych, obliczenia przeprowadzone przez nas uwzględniają sprzężenie między ruchem translacyjnym, a rotacyjnym cząsteczki białka. Sprzężenie to wywiera istotny wpływ na współczynnik oporu hydrodynamicznego oraz współczynnik lepkości wewnętrznej cząsteczek. Jest on wyrażany często przez tzw. promień hydrodynamiczny R_H , który zawiera tym samym informację o uśrednionych rozmiarach cząsteczki. Wartości promienia hydrodynamicznego wyznaczona według powyższego schematu obliczeń dla agregatów cząstek o różnym kształcie podane są w Tabeli 1. Wyznaczono również wartości R_H dla cząsteczek fibrynogenu, których kształt był opisywany dwoma modelami: model A - bez uwzględnienia obecności ramion bocznych oraz model B - z uwzględnieniem obecności tych ramion (Tabela 1). Porównanie uzyskanych wyników teoretycznych z pomiarami doświadczalnymi wykazało, że bardziej adekwatny jest model B, pozwalający na określenie konformacji cząsteczek białek w roztworach elektrolitów.

Tabela 1. Wyznaczone teoretycznie promienie hydrodynamiczne cząsteczek o różnym kształcie

Particle shape	R_H expression	Remarks, Ref.
 <p>Solid sphere linear aggregate</p>	$R_H = \frac{n_s}{\ln 2n_s - 0.253} a$	<p>Analytical interpolation valid for $10 \leq n_s \leq 450$ (1% precise)</p> <p>for $2 \leq n_s \leq 450$ numerical solution Ref.[1]</p>
 <p>Half circle made of n_s spheres</p>	$R_H = \frac{n_s}{0.95 \ln 2n_s + 0.02} a$	<p>Analytical interpolation valid for $10 \leq n_s \leq 450$ (3-1% precise)</p> <p>for $10 \leq n_s \leq 450$ numerical solution Ref.[1]</p>

 <p>Circle (ring) made of n_s spheres</p>	$R_H = \frac{n_s}{\frac{11}{12} \ln 2 n_s + 0.67} a$	<p>Analytical interpolation valid for $10 \leq n_s \leq 450$ (3-1% precise)</p> <p>for $10 \leq n_s \leq 450$ numerical solution Ref.[1]</p>
 <p>Fibrinogen Model A</p>	$R_{H_0} = 8.54 \text{ nm}$	<p>numerical solutions, this work</p>
 <p>Fibrinogen Model B</p>	$R_H = R_{H_0} + R_{H_\infty} - R_{H_0} \sin\left(\frac{\varphi}{82.5^\circ}\right)$ $R_{H_\infty} = 11.1 \text{ nm}$ $R_{H_0} = 8.67 \text{ nm}$	<p>numerical solutions, this work</p>

Uwagi - współczynnik dyfuzji cząstki jest związany z jej promieniem hydrodynamicznym następującą zależnością:

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta R_H}$$

[1] Z. Adamczyk, K. Sadlej, E. Wajnryb, M.L. Ekiel-Jeżewska, P. Warszyński, J. Colloid Interface Sci. 347, 2010, 192

11. Modelowanie teoretyczne kinetyki i równowagi procesów sorpcji jonów metali ciężkich na materiałach pochodzenia biologicznego

Projekt badawczy N N204 291238 [2010-2012]

(kierownik projektu; prof. dr hab. Władysław Rudziński)

Badano układy typu jony metalu/biosorbent z punktu widzenia efektów heterogeniczności powierzchni oraz ich przekładalności na ideę stałej wymiany jonowej. Dyspersja wartości stałej wymiany jonowej zależy od: (i) dyspersji stałych powinowactwa biosorbentu względem jonów metalu oraz protonów; (ii) istnienia lub braku korelacji pomiędzy wartościami stałych powinowactwa względem jonów metali (K_M) oraz protonów (K_H). W przypadku silnej korelacji, dyspersja stałej wymiany jonowej jest mniejsza (w skrajnym przypadku: taka sama), w porównaniu do dyspersji K_M i K_H . Z drugiej strony, w przypadku braku korelacji, dyspersja stałej wymiany jonowej jest zawsze większa niż te charakteryzujące stałe powinowactwa. Zaproponowano przybliżenie dla układów z dyskretnymi dystrybucjami K_M i K_H , oparte na zastąpieniu kilku stałych powinowactwa przez jedną (średnią) stałą wymiany jonowej; przybliżenie to jest dokładne w przypadku wiązania jednocentrowego oraz dla procesów przebiegających przy pH niższych niż najniższa wartość pK_a w układzie.

Badano problem interpretacji danych eksperymentalnych odnoszących się do termodynamiki wiązania dwuwartościowych jonów metali przez biosorbenty zawierające alginiany. Nawet, jeśli układy mają bardzo podobne właściwości, parametry termodynamiczne towarzyszące wiązaniu metali (zmiany entalpii i entropii układu, odpowiednio ΔH i ΔS) są bardzo rozbieżne. Zbadano ten efekt w sposób ilościowy i jakościowy. Okazało się, że na uzyskane wartości ΔH i ΔS wpływają liczne czynniki "techniczne" (pH, siła jonowa) oraz te związane z przyjętym modelem (np. wiązanie jedno- lub dwucentrowe). Zaproponowano sposoby na odróżnienie pomiędzy "pozornymi" i "rzeczywistymi" wartościami ΔH i ΔS .

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

Projekt badawczy N N204 269038 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

W ramach realizacji zadania 1 (Badania o charakterze aplikacyjnym) przeprowadzono badania mające na celu znalezienie efektywnej metody immobilizacji dehydrogenazy etylobenzenowej (EBDH). Zastosowano dwa komplementarne podejścia: immobilizację kowalencyjną ze zmodyfikowanym nośnikiem krzemionkowym oraz adsorpcyjną z syntetycznym hydroksyapatytem (BioRad).

W pierwszym etapie badań enzym został zimmobilizowany poprzez wiązanie kowalencyjne na sfunkcjonalizowanym grupami AEAPTS (N-(2-aminoetyl)-3-aminopropyl-trimetoksyilan) proszku krzemionkowym SBA-S przy zastosowaniu aldehydu glutarowego jako czynnika wiążącego. Aktywność tak zimmobilizowanego enzymu określano na podstawie chromatograficznych pomiarów stężenia (S)-1-feniloetanolu, który jest produktem reakcji EBDH z etylobenzenem. Reakcje prowadzono w próbkach z mieszalnikiem symulując warunki reaktora typu *batch*.

Badania wykazały, że immobilizowany kowalencyjnie EBDH cechuje niestety niska stabilność operacyjna. Enzym wykazuje ponad 3-krotnie mniejszą konwersję substratów oraz ponad 10-krotnie niższą aktywność w zestawieniu z białkiem natywnym. Ponadto analiza aktywności enzymu wykazała, że przetrzymywana w temperaturze 0°C w środowisku utleniającym (roztwór ferrocenianu tetrafluoroboranu w buforze TRIS/HCl pH 7.5) immobilizowana EBDH jest aktywna przez około 32 dni, przy czym bardzo wyraźny jest trend spadkowy aktywności enzymu wraz z upływem czasu. Natywny, rozmrożony enzym przechowywany w temperaturze 0°C po 10 dniach traci około 90% aktywności katalitycznej.

Drugim badanym sposobem immobilizacji była niekowalencyjna adsorpcja białka na proszku hydroksyapatytowym (HAp). Prowadzone równolegle: spektrofotometryczny test aktywności i ilościowa analiza HPLC produktów reakcji EBDH pozwoliły na określenie aktywności immobilizowanego białka w pierwszym dniu po immobilizacji. Jest ona na poziomie ok. 12% aktywności białka natywnego. Spektrofotometryczne analizy aktywności polegały na punktowych pomiarach spadku absorbancji akceptora elektronowego, którego stężenie w roztworze reakcyjnym w sposób odwrotnie proporcjonalny przekłada się na stężenie S-1-feniloetanolu. Pomiar aktywności wykazały, że enzym osadzony na HAp traci 100% aktywności w przeciągu 10 dni przechowywania enzymu w środowisku utleniającym w temperaturze 0°C.

W ramach realizacji zadania 2 przeprowadzono obliczenia profilu energetycznego reakcji za pomocą metodologii QM:MM. Jako model wybrano podjednostkę α wraz z wodą krystalizacyjną, wybierając do części kwantowej fragment kofaktora molibdenowego, resztę Asp²²³, His¹⁹² oraz substrat (etylobenzen). Przeprowadzono modelowanie z wykorzystaniem metodologii *mechanical embedding* oraz *electrostatic embedding*. Badania wykazały znaczący wpływ zastosowanej metodologii (włączonej lub wyłączonej polaryzacji części QM przez część MM) na proces przekazywania drugiego elektronu. Wykazano wysoki stopień stabilizacji elektrostatycznej karbokationowego produktu przejściowego E-I oraz stanu przejściowego związanego z przeniesieniem grupy OH (TS2) przez białko w ujęciu *electrostatic embedding*.

13. Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami

Projekt badawczy N N204 269238 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Robert Socha)

W ciągu ostatnich lat obserwuje się wzrastające zainteresowanie mechanizmami wzrostu cienkowarstwowych układów epitaksjalnych typu tlenek metalu/metal, które stają się coraz ważniejsze w mikro- i nanoelektronice oraz w katalizie heterogenicznej. Nieliczne próby otrzymywania epitaksjalnych tlenków manganu (głównie MnO oraz Mn₃O₄) podjęte w okresie ostatnich kilku lat powodują, że w tym obszarze nauki wciąż istnieje możliwość syntezy układów o ciekawych właściwościach, odmiennych od właściwości układów występujących w naturze czy też syntezowanych w formie zdyspergowanej i często wykazujących znacznie podwyższoną selektywność. W naszych badaniach skoncentrowaliśmy się na zastosowaniu różnych sposobów syntezy mieszanych tlenków manganowo(II)-żelazowych(II).

Syntezy przeprowadzono z zastosowaniem utlenienia stopu międzymetalicznego Fe_xMn_{1-x} lub też wygrzewania metalicznej warstwy Fe osadzonej na tlenku manganu (II). Jako podłoże zastosowano MgO(001) wygrzany w temperaturze 820 K. Naparowanie manganu i żelaza wykonano z tzw. komórki efuzyjnej. Użyto izotopu ⁵⁷Fe, co pozwoliło na zastosowanie spektroskopii Mössbauerowskiej (MS). Dyfrakcja elektronów niskiej energii (LEED) została użyta do weryfikacji otrzymanej struktury a spektroskopia fotoelektronów generowanych promieniowaniem X (XPS/ESCA) oraz spektroskopia elektronów Augera (AES i XAES) do analizy składu i stanów elektronowych pierwiastków na otrzymanych powierzchniach.

Stwierdzono, że utlenienie metalicznego manganu prowadzi do otrzymania MnO(001) w szerokim zakresie ciśnienia parcjalnego tlenu ($2 \cdot 10^{-7}$ - $1 \cdot 10^{-6}$ mbar) i temperatury (423-673 K). Grubość stechiometrycznego MnO osiągała w takich warunkach 6 nm. Zastosowanie utleniania manganu w temperaturze powyżej 673 K prowadziło do wzrostu stężenia jonów Mn³⁺ i Mn⁺⁴ aczkolwiek jony Mn²⁺ wciąż były głównym składnikiem otrzymanego tlenku.

W pierwszej procedurze syntezy, nanoszono warstwę manganu o grubości 20 nm przykrytą następnie 2 nm warstwą ⁵⁷Fe. Po zastosowaniu wygrzewania otrzymano bimetaliczny stop o strukturze odpowiadającej metalicznemu manganowi. Wygrzewanie wykonano w zakresie temperatur 373-673 K, co w efekcie skutkowało rozpuszczeniem się żelaza w sieci manganu. Powstały stop był następnie utleniany ($1 \cdot 10^{-7}$ - $5 \cdot 10^{-6}$ mbar), co prowadziło do otrzymania tlenku mieszanego Fe_xMn_{1-x}O izostrukuralnego z MnO(001).

W drugiej metodzie syntezy, przygotowano warstwę MnO(001) poprzez utlenienie podłoża z metalicznego manganu (20 nm). Następnie, na powierzchni MnO osadzono metaliczne żelazo ⁵⁷Fe (2 nm) w temperaturze 295 K. Otrzymano układ wykazujący ostry interfejs Fe/MnO (1 monowarstwa FeO potwierdzona przez MS). Wygrzanie takiego układu w 673 K prowadziło do otrzymania Fe_xMn_{1-x}O.

Stwierdzono, że niezależnie od zastosowanej metody syntezy metaliczne żelazo zawsze było obecne na powierzchni badanych układów. Dodatkowo, pomiar XPS pokazał deficyt tlenu na interfejsie MnO/Mn.

Obydwie zastosowane metody oprowadziły do otrzymania podobnego składu tlenku Fe_xMn_{1-x}O, gdzie mangan (II) i żelazo (II) były głównymi składnikami chemicznymi układu (XPS, AES). Metoda LEED wykazała, że struktura powierzchni była zawsze taka sama.

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

Projekt badawczy N N507 616638 [2010-2013]

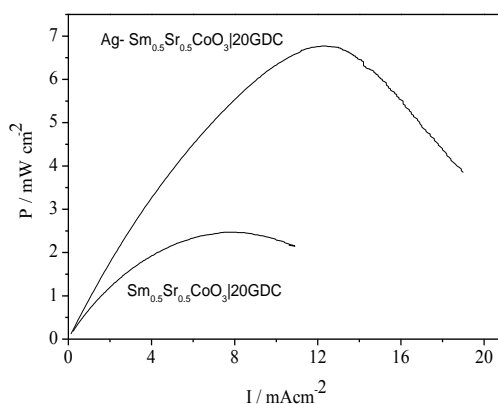
(kierownik projektu: dr Michał Mosiałek)

Stało-tlenkowe wysokotemperaturowe ogniwa paliwowe (SOFCs) są uważane za obiecujące, przyjazne dla środowiska źródła energii elektrycznej o wysokiej sprawności. W ostatnich latach znaczny wysiłek został włożony, aby obniżyć temperaturę pracy tych ogniw do zakresu 500-700°C. Poważnym problemem w konstrukcji ogniw paliwowych tego typu jest wysoki nadpotencjał reakcji redukcji tlenu. Jednym ze sposobów rozwiązania tego problemu jest obniżenie nadpotencjału reakcji redukcji tlenu poprzez dodanie srebra do materiału katodowego. Nasze badania skupiają się na możliwości zastosowania metalicznego srebra jako materiału na kompozytowe katody pracujące w temperaturach do 600°C.

W roku 2011 był kontynuowany pierwszy etap projektu "Opracowanie metody wytwarzania elektrodowych materiałów kompozytowych zawierających srebro. Charakterystyka otrzymanych materiałów (skład fazowy, porowatość, mikrostruktura)". Wykonano syntezy materiału katodowego $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-d}$ oraz materiału elektrolitowego $\text{Sc}_{0.09}\text{Zr}_{0.91}\text{O}_{2-d}$ 9ScSZ, $\text{Gd}_{0.2}\text{Ce}_{0.8}\text{O}_{1.9}$ 20GDC. Struktura otrzymanych związków została zbadana metodami XRD, SEM, EDS i XPS. Z materiałów tych zostały wytworzone nieporowate dyski. Z dysku LSCF zostały wycięte igły celem przeprowadzenia pomiarów na elektrodach punktowych.

Rozpoczęty został drugi etap realizacji projektu: "Wykonanie pomiarów elektrochemicznych w celu określenia charakterystyki redukcji tlenu na złączach Ag|Elektrolit tlenkowy (SDC, GDC, ScSZ)". Wykonane zostały pomiary elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej (ESI) na złączach Ag|GDC oraz Ag|ScSZ w zależności od temperatury i stężenia tlenu.

Rozpoczęty został również trzeci etap realizacji projektu "Wykonanie pomiarów elektrochemicznych w celu określenia charakterystyki reakcji redukcji tlenu na złączach materiał kompozytowy zawierający srebro | elektrolit tlenkowy". Wykonano porowate elektrody SSC oraz porowate kompozytowe Ag/SSC wprowadzając srebro do struktury elektrody trzema technikami. Zmierzono widma ESI otrzymanych elektrod w różnych temperaturach w zależności od stężenia tlenu. Stwierdzono, że wprowadzenie srebra do elektrody obniża impedancję reakcji redukcji tlenu a w ogniwach z wprowadzonym srebrem uzyskuje się wyższe gęstości mocy.



Rys. 1. Gęstość mocy w ogniwach Ag/ $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ |GDC|Ni i $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ |GDC|Ni

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

Projekt badawczy N N204 546439 [2010-2012]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Wiesław Łasocha)

Wiele interesujących materiałów, takich jak zeolity, materiały warstwowe, czy włókniste krystalizuje w postaci polikryształów, często o słabej jakości. Materiały te mogą być cennymi katalizatorami czy kompozytami o ciekawych własnościach fizycznych. Ich badania strukturalne są bardzo trudne z uwagi na bardzo złą jakość (i ubogie, w klasycznym sensie, w informacji strukturalne) obrazy dyfrakcyjne.

W ramach projektu prowadzono prace:

- Doposażenie stanowiska badawczego (aparat X'pert pro mpd) w lampę Ag z zestawem filtrów, przeprowadzono testy pomiarowe. Przygotowano odpowiednie programy pomiarowe.
- Podjęto badania nad wyznaczaniem parametrów sieciowych dla nietypowych preparatów, w tym o wysokiej teksturze, jak i znacznych różnic wielkości parametrów sieciowych.
- Prowadzono prace nad zastosowaniem zarówno klasycznych (global optimization) jak i nowych metod, w tym 'charge flipping', do badań strukturalnych 'niestandardowych' preparatów. Obiektem badań były preparaty ciekłokrystaliczne, warstwowe maziste osady jak i sole kwasów karboksylowych o długich łańcuchach.
- Prowadzono prace nad niezależną weryfikacją modeli struktur poprzez metody nie-dyfrakcyjne. Wsparciem dla metod dyfrakcji proszkowej były metody obliczeniowe, w tym metoda DFT (Density Functional Theory), obliczenia tego typu prowadzono dla szeregu polimolibdenianów halogeno-anilin.
- W dalszych etapach planujemy badania strukturalne prowadzone w oparciu o formalizm PDF (Pair Distribution Function). Ich celem będzie nie tylko stawianie hipotez odnośnie budowy elementów strukturalnych, ale i ilościowa weryfikacja utworzonych modeli, poprzez ich udokładnianie w sposób podobny do metody Rietvelda.

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

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

Projekt badawczy N N204 546639 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Głównym celem naukowym projektu jest zbadanie mechanizmu tworzenia i stabilności wielowarstwowych filmów polielektrolitowych zawierających kazeinę i określenie stopnia zachowania aktywności biologicznej wbudowanej kazeiny (zdolność wiązania jonów wapnia). Do budowy filmów kazeinowo-polielektrolitowych została wybrana α i β kazeina jako polianiony oraz poli-L-lizyna, arginina i chitosan jako polikationy. W trakcie dotychczasowych prac dokonano szczegółowej analizy czynników wpływających na tworzenie filmów w środowisku wodnym, takich jak siła jonowa, pH roztworu i rodzaj polikationu oraz dla utworzonych filmów określono ich odporność na fizykochemiczne zmiany środowiska (pH, temperatura, zasolenie - wpływ elektrolitów).

Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe budowano z wykorzystaniem sekwencyjnej adsorpcji warstw polielektrolitowych (lbl-layer by layer) na podkładkach krzemowych Si/SiO₂ oraz na kryształach kwarcowych pokrytych złotem (QCM). Grubości filmów mierzono za pomocą elipsometrii i QCM. Badano zależność grubości filmów od siły jonowej roztworów, z których nakładane były warstwy oraz zachowanie się tych filmów w przypadku działania na nie roztworami o różnych wartościach pH. W wyniku przeprowadzonych badań zauważono, że optymalne warunki dla tworzenia filmów polimerowo-kazeinowych występują przy sile jonowej I=0.15 M NaCl (najgrubsze filmy). Filmy nie były odporne na roztwory o pH 2, gdyż w tych warunkach ładunek kazeiny przechodził w dodatni, oraz na roztwory o pH 11 z powodu neutralizacji PLL. W punkcie izoelektrycznym kazeiny - pH 4.5 tylko filmy z α - kazeiną były stabilne. W warunkach naturalnych filmy zawierające α - kazeinę także były bardziej stabilne niż te zawierające β -kazeinę, kiedy kontaktowane je z roztworami o różnych wartościach pH.

Filmy kazeinowo argininowe wykazywały dużo większe grubości w stosunku do warstw kazeinowo poli-L-lizynowych. Natomiast nie udało się uzyskać filmów kazeinowo-chitosanowych grubszych niż 6 nm ze względu na bardzo słabą adsorpcję chitosanu.

17. Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego

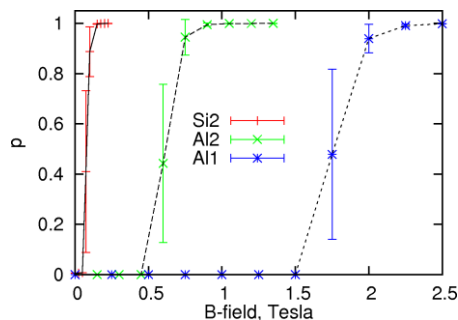
Projekt badawczy N N204 205240 [2011-2014]

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

Właściwości nanopojemnika molekularnego złożonego z nanorurki węglowej oraz przymocowanych do niej nanocząstek magnetycznych silnie zależą od właściwości materiałów użytych do jego budowy. O ile właściwości nanorurek węglowych są, w tym przypadku, raczej mało istotne to wybór materiału tworzącego nanocząstki magnetyczne jest kluczowy dla prawidłowego funkcjonowania układu jako tzw. nośnika leków. Kluczowym parametrem jest tu wartość magnetyzacji nasycenia. Stwierdzono na podstawie obliczeń, że musi być ona duża, aby w wyniku oddziaływania z polem magnetycznym dostarczyć do układu odpowiednio dużo energii potrzebnej do przełamania barier aktywacji towarzyszących procesowi otwarcia nanopojemnika. Kolejnym bezspornym faktem wynikającym z obliczeń jest konieczność stosowania możliwie dużych nanocząstek, co ma wpływ na wartość stałych anizotropii magnetycznej.

Mając na uwadze szereg faktów eksperymentalnych, których nie można pominąć, pierwotny model nanopojemnika molekularnego został znacznie rozbudowany szczególnie w zakresie opisu nanocząstek magnetycznych. Tego typu układy nanostrukturalne zwykle nie są jednorodne ze względu na konieczność wytworzenia na ich powierzchni powłoki zabezpieczającej przed aglomeracją i rozkładem. Dlatego stworzono nowy model opisu nanocząstek magnetycznych o strukturze core/shell oraz zbadano kilka kombinacji materiałów jądra i powłoki. Jako materiał jądra wybrano metaliczny kobalt ze względu na wysoką wartość magnetyzacji nasycenia, natomiast jako materiał powłoki zbadano tlenek krzemu oraz tlenek glinu. Kilka innych materiałów przedyskutowano w sposób jakościowy na podstawie wyników uzyskanych dla SiO_2 oraz Al_2O_3 . Kolejnymi parametrami, których wpływ okazał się być bardzo istotny jest długość łańcucha alkilowego oraz grubość powłoki tlenkowej.

W rezultacie stwierdzono, że funkcjonalny nanopojemnik może być zbudowany wyłącznie z materiałów, których powłoka zabezpieczająca jest możliwie jak najcieńsza i charakteryzuje się wartością stałej Hamakera w zakresie $4\text{-}20 \cdot 10^{-20}$ J, zaś łańcuch alkilowy powinien być możliwie jak najkrótszy. Na Rysunku 1 porównano właściwości 3 przykładowych układów w sensie prawdopodobieństwa obserwacji stanu otwartego/zamkniętego w zależności od wartości indukcji pola magnetycznego.

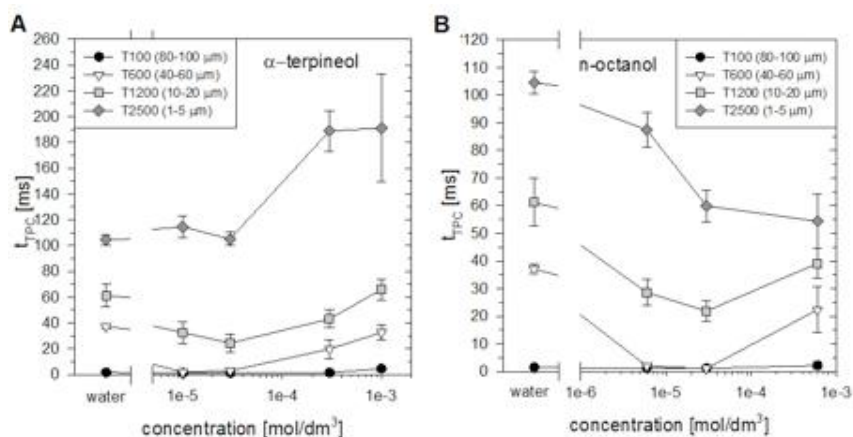


Rys. 1. Prawdopodobieństwo obserwacji nanopojemnika w stanie otwartym/zamkniętym w funkcji indukcji pola magnetycznego dla: Al1 - powłoki Al_2O_3 i 1 segmentu CH_2 ; Al2 - powłoki Al_2O_3 oraz 2 segmentów CH_2 ; Si2 - powłoki SiO_2 oraz 2 segmentów CH_2

18. Wpływ mikro- i nano-pęcherzyków na powierzchniach hydrofobowych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych

Projekt badawczy N N204 133640 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem projektu jest zbadanie wpływu (i) zdefiniowanej szorstkości powierzchni hydrofobowej oraz (ii) obecności submikronowych pęcherzyków powietrza na tych powierzchniach na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) ciecz/gaz/ciało stałe. W okresie sprawozdawczym badano kinetykę powstawania TPC podczas kolizji pęcherzyka z płytkami teflonowymi w wodzie oraz w roztworach α -terpineolu i n-oktanolu (spieniacze) o różnym stężeniu. Szorstkość Teflonu modyfikowana była w zakresie 1-100 μm . Ruch pęcherzyka o promieniu $R_b=0.74$ mm oraz jego zderzenia z powierzchnią i tworzenie TPC monitorowane było przy użyciu szybkiej kamery o częstotliwości 1040Hz. Odległość pomiędzy punktem formowania się pęcherzyka (otworem kapilary) a powierzchnią międzyfazową ustawiona była tak, aby pęcherzyk uderzał w powierzchnię z prędkością graniczną, która dla badanego R_b wynosiła 34.7 cm/s. Na podstawie analizy zarejestrowanych filmów określono wpływ badanych spieniaczy i szorstkości powierzchniowej na czas powstawania TPC (t_{TPC}). Wykazano, że w roztworach o małych stężeniach α -terpineolu i n-oktanolu, t_{TPC} ulegał skróceniu w porównaniu do wartości zmierzonych w wodzie destylowanej. Jednakże, przy wysokich stężeniach następowało zaskakujące wydłużenie wartości t_{TPC} , a wielkość tego efektu była uzależniona od szorstkości powierzchni Teflonu (patrz Rysunek 1). Jak widać np. dla płytki Teflonowej o szorstkości powierzchniowej 40-60 μm (T600), t_{TPC} uległ wydłużeniu nawet o 20-30 ms, kiedy stężenie α -terpineolu i n-oktanolu osiągało poziom $1 \cdot 10^{-3}$ M. Na podstawie dotychczasowych wyników można stwierdzić, że efekt wydłużenia t_{TPC} związany jest z obecnością powietrza na powierzchni ciała stałego. Wszystkie powierzchnie o wysokiej hydrofobowości (Teflon) wykazują wysokie powinowactwo do powietrza i dlatego podczas zanurzania płytek Teflonu w fazie wodnej powietrze może zostać "uwięzione" w nierównościach powierzchni. Potwierdzeniem słuszności tej hipotezy jest wydłużenie t_{TPC} w wyższych stężeniach badanych spieniaczy - wraz ze stężeniem spieniaczy- wzrasta stabilność filmów pianowych. Większa stabilność lokalnych filmów pianowych powstających pomiędzy "uwięzionym" pod powierzchnią Teflonu powietrzem (submikronowe pęcherzyki) a uderzającym w powierzchnię makropęcherzykiem jest odpowiedzialna za wydłużenie czasu powstawania TPC.



Rys. 1 Czas utworzenia TPC podczas zderzenia pęcherzyka gazu z powierzchnią Teflonu o różnej szorstkości w funkcji stężenia

19. Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji transmetalacji porfiryny i jej wybranych pochodnych

Projekt badawczy N N204 439640 [2011-2014]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Małgorzata Witko)

Celem badań było zbadanie mechanizmu transmetalacji porfiryny magnezu jonami miedzi(II). Badana reakcja jest z jednej strony reakcją modelową, która modeluje proces zastępowania magnezu w chlorofilu jonami miedzi, który zachodzi w roślinach rosnących na glebach zanieczyszczonych metalami ciężkimi, z drugiej zaś jest jedną z metod otrzymywania metaloporfiryn z różnymi metalami centralnymi.

Przedstawione badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą DFT (Teoria Funkcjonałów Gęstości) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z zastosowaniem przybliżenia R_i , zaimplementowanego w programie Turbomole. Badane procesy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań, kąty walencyjne), elektronowych (ładunki) oraz zmian energii towarzyszących poszczególnym etapom badanej reakcji.

W pierwszym kroku scharakteryzowano sześciokoordynacyjny kompleks z dwoma cząsteczkami acetonitrylu jako ligandami aksjalnymi. Ten układ modeluje solwatowaną porfirynę magnezu w roztworze ACN, która jest stanem wyjściowym dla badanej reakcji. Następnie określono możliwe struktury adduktów porfiryny magnezu z jonami octanowymi, obecnymi w roztworze. Aby dokładnie określić naturę oddziaływania magnez - ligandy aksjalne (acetonitryl, octan) zastosowano rachunek zaburzeń o adaptowanej symetrii.

W dalszej kolejności prowadzono badania nad mechanizmem wymiany magnezu na jon miedzi. Na podstawie przeprowadzonych badań teoretycznych i doświadczalnych postuluje się, że zachodzi on w następujących etapach:

1. atak jonu octanowego na jon Mg^{2+} w porfirynie, dysocjacja ligandu ACN w pozycji aksjalnej,
2. deformacja pierścienia porfirynowego i asocjacja jonu miedzi poprzez wiązanie z jednym z azotów z pierścienia,
3. utworzenie tzw. kompleksu "sitting atop", w którym oba jony metalu tworzą wiązanie z ligandem porfirynowym,
4. oddysocjowanie jonu magnezu, schelatowanego przez jon octanowy, "wejście" jonu miedzi do pierścienia porfirynowego.

20. Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności

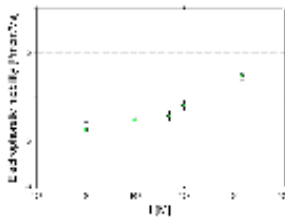
Projekt badawczy N N204 439040 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr inż. Jakub Barbasz)

Projekt realizowany zgodnie z harmonogramem. Prowadzono badania nad budową modelu tworzenia warstwy w wyniku adsorpcji równoległej w oparciu o algorytmy RSA i dynamiki molekularnej.

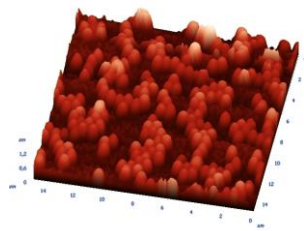
Rozwijano model kinetyki powstawania warstwy będący w dobrej zgodności z wynikami doświadczalnymi.

Przeprowadzono charakterystykę objętościową lateksów polistyrenowych oraz białek (ludzka albumina osoczowa (HSA) i fibrynogen).

Określono rozmiary, ładunki powierzchniowe, ruchliwość elektroforetyczną (przykład) oraz stabilności roztworów w zależności od stężenia oraz siły jonowej.



Elektroforetyczna mobilność HSA (Human Serum Albumin 99%, agarose gel electroforesis; kwasy tłuszczowe < 0.007%)



Trójwymiarowy obraz AFM 3D mieszaniny cząstek lateksu adsorbowanych na powierzchni miki

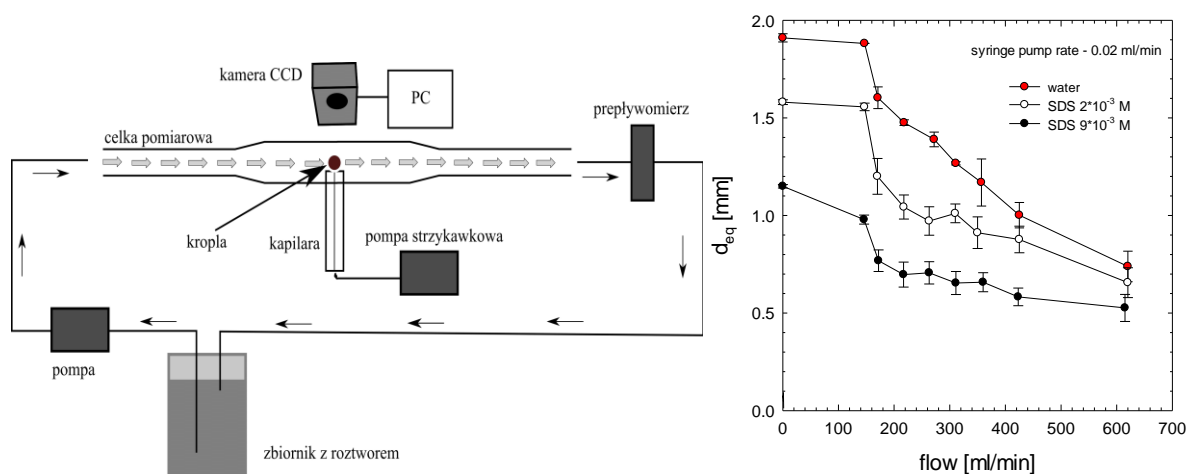
21. Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek

Projekt badawczy N N209 757340 [2011-2014]

(kierownik projektu: prof. dr hab inż. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych efektywnej metody otrzymywania stabilnych kropli emulsji o kontrolowanych rozmiarach metodą emulsyfikacji membranowej, które następnie zostaną wykorzystane jako rdzenie do wytworzenia mikrokapsulek. Zastosowanie emulsyfikacji membranowej przy odpowiednim doborze materiału membrany, jej porowatości i średniego rodzaju porów oraz surfaktantów czy polielektrolitów umożliwi otrzymywanie monodispersyjnych zawiesin o kontrolowanym rozmiarze kropli przy niskim nakładzie energii, co powinno umożliwić produkcję kapsulek na skalę przemysłową. Dla zademonstrowania skuteczności metodyki wytwarzania mikrokapsulek za pomocą emulsyfikacji membranowej planujemy określenie warunków enkapsulacji dla związków modelowych, jak i dla wybranych czynników aktywnych.

W 2011 roku skupiliśmy się na opracowaniu modelu i symulacjach procesu wzrostu pojedynczej kropli na izolowanym porze w roztworach surfaktantów i w obecności określonej siły ścinającej (metoda "single pore") oraz na weryfikacji eksperymentalnej wyników symulacji. Prace teoretyczne polegały na sformułowaniu teoretycznego modelu wzrostu kropli uwzględniającego siły dynamicznego napięcia międzyfazowego, siłę wyporu oraz siłę hydrodynamiczną wynikającą z działania przepływu ścinającego na kroplę. Model został poddany weryfikacji na podstawie wyników eksperymentalnych uzyskanych w pomiarach metodą pojedynczego poru. Badania polegały na pomiarach wpływu wielkości siły ścinającej na wielkość pojedynczej kropli olejowej powstającej w dobrze zdefiniowanych i kontrolowanych warunkach. Kropla wytwarzana była na pojedynczej kapilarze o zadanej średnicy, a proces jej narastania oraz moment oderwania od kapilary monitorowany był przy pomocy kamery CCD w układzie przedstawionym na rysunku 1a. Rysunek 1b przedstawia zależność wielkości kropli od prędkości przepływu fazy dyspergującej dla układu dodekan-SDS-Woda.



Rysunek 1a) schemat układu pomiarowego pojedynczego pora, b) zależność wielkości kropli od prędkości przepływu fazy dyspergującej dla układu dodekan-SDS-woda

PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE

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

Projekt badawczy promotorski N N205 018934 [2008-2010]

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

Heteropolikwasy to grupa związków chemicznych o wzorze ogólnym $[X_xM_mO_y]^{q-}$ ($x \leq m$), gdzie X stanowi atom centralny (np. Si^{4+} , P^{5+} , As^{5+} , Ge^{4+}), a M jest jonem metalu przejściowego, najczęściej molibdenu lub wolframu na najwyższym stopniu utlenienia. Atrakcyjność tych układów z punktu widzenia katalizy wynika z możliwości kontrolowania ich właściwości kwasowo-zasadowych i redoksowych poprzez odpowiednią modyfikację składu chemicznego.

Kwasy $H_3PMo_{12}O_{40}$ i $H_3PW_{12}O_{40}$ zostały zmodyfikowane poprzez a) zastąpienie protonów kompensujących ładunek anionu kationami metalu przejściowego i b) wprowadzenie kationów metalu przejściowego w tzw. pozycje lakunarne. W pierwszym przypadku otrzymano serię soli kobaltowych o różnym stopniu podstawienia kwasowych protonów przez jony Co(II). W drugim, w pozycje lakunarne wprowadzono jony Co(II), Mn(II) lub Fe(III). Celem zwiększenia rozpuszczalności w medium organicznym otrzymano sole tetrabutylamoniowe tak zmodyfikowanych anionów. Otrzymane preparaty zostały scharakteryzowane przy pomocy metod XRF, ICP-OES, XRD, DSC-TG, spektroskopii UV-Vis i FTIR. Wyniki badań potwierdziły uzyskanie zamierzonych związków. Otrzymane heteropolizwiązki zastosowano jako katalizatory reakcji utleniania fenolu, cyklooktanu i cykloheksenu w fazie ciekłej. W sprawozdawanym okresie głównym tematem badań było określenie aktywności i selektywności otrzymanych preparatów w reakcji konwersji etanolu.

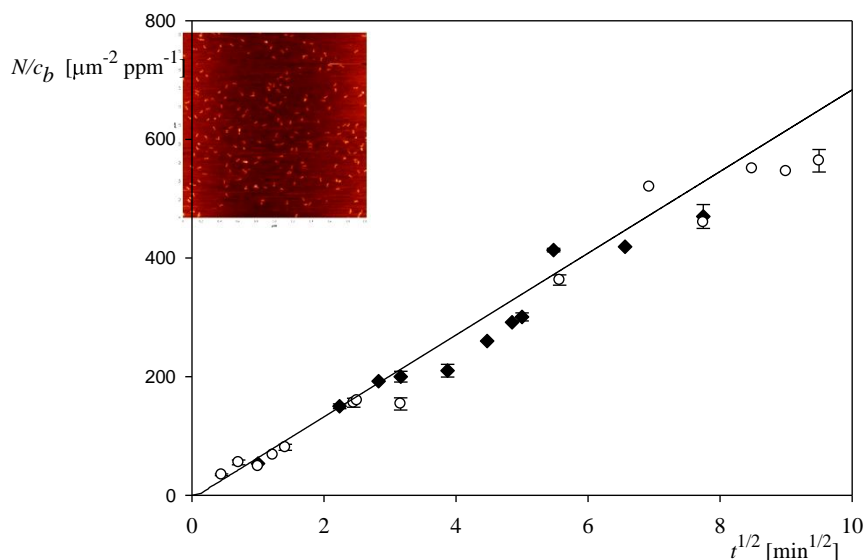
Badania spektrum produktów powstających w reakcji rozkładu etanolu potwierdziły, że, zgodnie z oczekiwaniami, katalizatory na osnowie kwasu 12-wolframofosforowego wykazują wyższą kwasowość niż analogiczne układy 12-molibdenofosforowe. Stwierdzono, że zachodzące na centrach kwasowych odwodnienia etanolu do etylenu i eteru dietylowego jest katalizowane zarówno przez protony kompensujących ładunek heteropolianionów, jak i protony generowanych na skutek dysocjacji wody skoordynowanej wokół kationów Co(II). Utleniające odwodnienie do aldehydu octowego, zależne od funkcji redoksowej katalizatora, obserwowano tylko na katalizatorach serii 12-molibdenofosforowej. Wynikało ono z udziału centrów molibdenowych w procesie przeniesienia elektronów i wyłącznie pośrednio zależało od obecności kationów kobaltu w drugorzędowej strukturze heteropolisoli. W procesie rozkładu etanolu na tetrabutylamoniowych solach lakunarnych heteropolikwasów podstawionych jonami metali przejściowych główną ścieżką reakcji było, niezależnie od rodzaju podstawionego metalu, odwodnienie do etylenu. Zachodzenie tej reakcji przypisano katalizującemu działaniu protonów kompensujących, wraz z kationami tetrabutylamoniowymi, ładunek heteropolianionów.

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

Projekt badawczy promotorski N 204 166336 [2009-2011]

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

W ramach zadania badawczego przeprowadzono obszerne pomiary kinetyki adsorpcji na powierzchni miki, cząsteczek fibrynogenu (Fb), jednego z najważniejszych białek osocza krwi, odpowiedzialnego za zjawiska krzepnięcia. W celu doboru optymalnych parametrów dla pomiarów adsorpcji Fb, wyznaczono jego współczynnik dyfuzji oraz ruchliwość elektroforetyczną w funkcji siły jonowej oraz pH. Na podstawie tych pomiarów, wyznaczono efektywny (nieskompensowany) ładunek powierzchniowy białka, jak również jego punkt izoelektryczny. Tak więc, dla $\text{pH} < 5.8$ cząsteczki Fb posiadały dodatni ładunek powierzchniowy osiągający maksymalną wartość równą 34 ładunkom elementarnym dla pH ok. 3.5. To istotne spostrzeżenie wskazuje, że dla tego zakresu pH cząsteczki Fb mogą ulegać adsorpcji na powierzchniach o ujemnym ładunku, np. na powierzchni miki, której właściwości elektrokinetyczne zostały określone przy pomocy metody potencjału przepływu. W następnym etapie prac przeprowadzono pomiary kinetyki adsorpcji Fb na powierzchni miki dla $\text{pH}=3,5$ i $7,4$ oraz różnych sił jonowych. Pomiary prowadzono w warunkach transportu dyfuzyjnego przy użyciu bezpośredniej metodyki opartej na mikroskopii AFM (semi-contact mode). Przykładowa monowarstwa cząsteczki fibrynogenu na powierzchni miki oraz kinetyka adsorpcji tego białka pokazana jest na Rysunku 1. Na podstawie tego typu pomiarów kinetycznych można określić w ilościowy sposób kinetykę adsorpcji tego białka, a tym samym jego stężenie objętościowe na poziomie nawet poniżej 0.1 ppm. Ponadto, pomiary AFM pozwalają na wyznaczenie nie tylko stężenia powierzchniowego cząstek, lecz również na określenie konformacji cząsteczek białka oraz jego rozmiarów (długości i przekroju poprzecznego).



Rys.1. Zależność znormalizowanego pokrycia powierzchniowego fibrynogenu $N/c_b [\mu\text{m}^{-2} \text{ppm}^{-1}]$ od pierwiastka z czasu adsorpcji $t^{1/2}$. Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane przy pomocy metody AFM dla $I=10^{-3}$ M oraz pH 3.5 (punkty wypełnione) oraz $\text{pH}=7.4$ (punkty niewypełnione). Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne obliczone dla modelu RSA. W górnej części rysunku przedstawiono monowarstwę fibrynogenu (AFM).

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

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

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

Składowe metaliczne katalizatora hybrydowego do jednoetapowej syntezy eteru dwumetylowego z gazu syntezowego (proces STD) typu Cu/Zn/Al/X oraz Cu/Zn/Zr/X, gdzie X=Mn, Ga otrzymano metodą węglanową oraz cytrynianową. Właściwości fizykochemiczne zsyntetyzowane preparatów zostały określone technikami: XRD, H₂-TPR, SEM/EDS, ICP-AES, rozkładu N₂O, adsorpcji N₂ oraz adsorpcji CO z detekcją w podczerwieni (FTIR). Jako składowej kwasowej katalizatora hybrydowego użyto montmorylonitu K10, który następnie modyfikowano przez naniesienie jednej monowarstwy heteropolikwasu wolframowo-fosforowego (HPW). Właściwości fizykochemiczne składowych kwasowych zostały wyznaczone przy użyciu następujących technik pomiarowych: XRD, UV-VIS, adsorpcji N₂. Kwasowość próbek zbadano stosując reakcję sondę rozkładu metanolu do eteru dwumetylowego oraz adsorpcję pirydyny z detekcją w podczerwieni.

Na podstawie przeprowadzanych analiz stwierdzono, że katalizatory z serii węglanowej charakteryzują się ponad dwukrotnie mniejszymi rozmiarami krystalitów CuO, dwukrotnie większą dyspersją miedzi (D_{Cu}), większą powierzchnią miedzi aktywnej oraz większą powierzchnią BET niż analogiczne składowe metaliczne otrzymane metodą cytrynianową. W składowych metalicznych zawierających glin dodatek galu oraz manganu wpływa na zmniejszenie rozmiarów krystalitów CuO, natomiast w przypadku składowych metalicznych zawierających cyrkon zamiast glinu wpływ dodatku galu oraz manganu na rozmiar krystalitów zależy od stosunku ilości cyrkonu do promotora (Zr/P). Dla obu serii składowych metalicznych istnieje liniowa zależność pomiędzy rozmiarami krystalitów CuO w preparatach przed redukcją a rozmiarami powierzchniowych krystalitów Cu⁰ po redukcji.

Dominującą fazą krystaliczną, obecną we wszystkich preparatach po kalcynacji jest tlenek miedzi (II), scharakteryzowany przez dwa główne refleksy dla kąta $2\theta=35.5^\circ$ i 39° . Drugą obserwowaną fazą krystaliczną jest tlenek cynku ($2\theta=32^\circ$). Na dyfraktogramach katalizatorów brak jest natomiast refleksów od pozostałych tlenków (Al₂O₃, ZrO₂, MnO, Ga₂O₃). Przyczyną tego może być amorficzność ich struktury (wynikająca ze stosunkowo niskiej temperatury kalcynacji) lub ich niewielka zawartość w porównaniu do zawartości CuO. W oparciu o analizę UV-VIS stwierdzono, że na powierzchni montmorylonitu K10 obecne jest 0,8 monowarstwy HPW. Badania w podczerwieni z zastosowaniem pirydyny jako cząsteczki sondy udowodniły, że naniesienie HPW na nośnik montmorylonitowy prowadzi do wzrostu kwasowości powierzchni - zwiększeniu ulegają zarówno stężenie, jak i moc centrów kwasowych w porównaniu do niemodyfikowanego montmorylonitu K10.

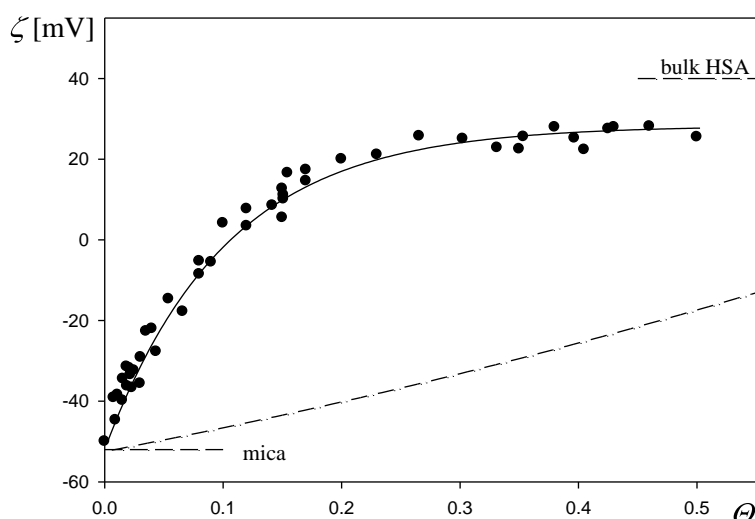
Wszystkie katalizatory charakteryzuje maksimum wydajności do DME w zakresie temperatur 280-300°C. Na podstawie uzyskanych wyników badań stwierdzono, że aktywność katalizatora hybrydowego do procesu STD zależy od dyspersji miedzi (D_{Cu}) w składowej metalicznej oraz od mocy kwasowej komponenty kwasowej.

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

projekt badawczy promotorski N N204 137537 [2009-2012]

(promotor: prof. dr hab inż. Zbigniew Adamczyk, doktorant: mgr Maria Dąbkowska)

Niniejsze badania miały na celu określenie granic stosowalności modelu teoretycznego, umożliwiającego obliczenie potencjału przepływu dla powierzchni pokrytych nanocząstkami koloidalnymi, polimerami i białkami. Ma to istotne znaczenie poznawcze i aplikacyjne, umożliwiając opracowanie unikatowej metody wyznaczania kinetyki adsorpcji i desorpcji białek z roztworów w warunkach *in situ*. W celu ilościowego określenia stosowalności tego modelu przeprowadzono pomiary potencjału przepływu dla albuminy osocza krwi, jednego z najbardziej podstawowych białek globularnych. Warstewki albuminy na powierzchni miki o kontrolowanej gęstości wytwarzano w warunkach transportu dyfuzyjnego bezpośrednio w mikroprzepływowym, czteroelektrodowym naczynku pomiarowym. Stopień pokrycia białkiem określano w sposób bezpośredni przy pomocy pomiarów AFM. Zależności wyznaczonego w ten sposób potencjału zeta powierzchni od pokrycia białkiem Θ przedstawiono na Rysunku 1 ($\text{pH}=3.5 \cdot 10^{-2}$ M NaCl). Wyniki doświadczalne, interpretowano w oparciu o obliczenia teoretyczne uzyskane na podstawie różnych modeli adsorpcji, m.in. modelu Gouya-Chapmana (linia kropkowo-kreskowana na Rysunku 1). Jak widać, model ten jest nieadekwatny, w przeciwieństwie do rozwiniętego przez nas modelu (linia ciągła na Rysunku 1), który postuluje monowarstwową adsorpcję indywidualnych cząsteczek albuminy na powierzchni miki. Wyniki przedstawione na Rysunku 1 wskazują jednoznacznie, że zastosowana metodyka pomiarowa oparta na wyznaczaniu potencjału przepływu umożliwia precyzyjne wyznaczenie stopnia pokrycia powierzchni albuminą. Jest to szczególnie istotne dla zakresu niskiego pokrycia, gdyż inne metody doświadczalne zawodzą.



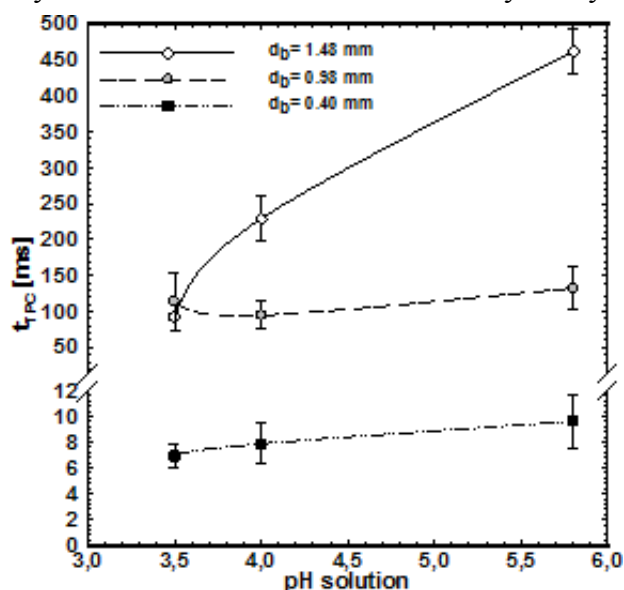
Rys. 1. Zależność potencjału zeta miki ζ od pokrycia albuminą (human serum albumin, HSA). Punkty oznaczają wyniki doświadczalne uzyskane przy pomocy metody potencjału przepływu ($\text{pH}=3.5$, $I=10^{-2}$ M). Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne obliczone na podstawie modelu trójwymiarowej adsorpcji, natomiast linia kropkowo-kreskowana oznacza wyniki teoretyczne obliczone z modelu Gouya-Chapmana. [M. Dąbkowska, Z. Adamczyk, J. Colloid Interface Sci., 366, 2012, 105-113]

5. Wpływ surfaktantów kationowych i pH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości

projekt badawczy promotorski N N204 179439 [2010-2012]

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

Celem projektu jest określenie wzajemnej roli oddziaływań elektrostatycznych oraz hydrofobowości powierzchni próbki na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) gaz/ciecz/ciało stałe na powierzchniach o niskiej hydrofobowości w warunkach dynamicznych. Pomiary wykonano na hydrofilowych i hydrofobizowanych ($\theta_{adv}=40^\circ$) oktyltrihydrosilanem (OTHS) powierzchniach filmów tlenku tytanu (TiO_2) naniesionych na płytki szklane. Punkt izoelektryczny (IEP) tlenku tytanu znajduje się przy $pH=4,7$, natomiast w przypadku pęcherzyków powietrza $pH_{IEP}=2$. A zatem w zakresie $2 < pH < 4,7$ powinny występować przyciągające oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy powierzchniami TiO_2 i pęcherzyka gazowego. Eksperymenty wykonano w wodnych roztworach o pH 3,5; 4,0 oraz 5,8. W pH 5,8 powierzchnie pęcherzyka i próbki są ujemnie naładowane, czyli w filmie ciekłym rozdzielającym te powierzchnie będą występowały odpychające oddziaływania elektrostatyczne. Natomiast przy pH 3,5 oraz 4,0 będą występowały przyciągające oddziaływania elektrostatyczne. Pomiary kinetyki powstawania kontaktu trójfazowego wykonano dla różnych wielkości pęcherzyków (d_{bubble}): 0,4; 0,98 i 1,48 mm. Najmniejsze z wymienionych: 0,4 mm generowano przy użyciu mikrofluidycznego chipa z połączeniem kanałów w kształcie litery T. Pozostałe pęcherzyki powstawały na kapilarach o różnej średnicy wewnętrznej (0,025 i 0,075 mm). Czas powstawania kontaktu trójfazowego (t_{TPC}) mierzono od momentu pierwszej kolizji pęcherzyka z powierzchnią TiO_2 , aż do momentu przerwania ciekłego filmu i utworzenia TPC. Niezależnie od wielkości pęcherzyka obserwowano, znaczne wydłużenie czasu powstawania kontaktu trójfazowego przy pH 5,8 (patrz Rysunek 1), tzn. przy pH gdzie występowały odpychające oddziaływania elektrostatyczne. Przykładowo, dla $d_{bubble}=1,48$ mm w pH 3,5 $t_{TPC}=92,2\pm 4,6$ ms; w pH 4,0 $t_{TPC}=229,4\pm 32,3$ ms; w pH 5,8 $t_{TPC}=462,0\pm 31,0$ ms. Jak widać (Rysunek 1) także czas powstawania kontaktu trójfazowego wzrastał silnie wraz ze wzrostem średnicy pęcherzyka, co jest związane z zależnością kinetyki wyciekania filmów od ich średnicy. Uzyskane wyniki pokazują istotną rolę oddziaływań



elektrostatycznych pomiędzy powierzchniami międzyfazowymi ciecz/gaz i ciecz/ciało stałe w kinetyce powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości. Aby powstał kontakt trójfazowy gaz/ciecz/ciało stałe musi zostać przerwany film ciekły, a siły elektrostatyczne są istotnym czynnikiem wpływającym na stabilność filmów zwilżających na powierzchniach o niskiej hydrofobowości.

Rys. 1. Zależność czasu powstawania kontaktu trójfazowego od pH roztworu i wielkości pęcherzyka

6. Odpowiedź strukturalna zapraw z cementów romańskich na wysychanie

Projekt badawczy promotorski N N105 429140 [2011-2012]

(promotor *Ł prof. dr hab. Roman Kozłowski, doktorant: mgr Dariusz Wilk*)

Cementy romańskie były kluczowymi materiałami do łatwego i ekonomicznego wytwarzania tynków i elementów dekoracyjnych na elewacjach budynków XIX i początku XX wieku. Powstawanie spękań zapraw romańskich jest jedną z najważniejszych barier w powszechnej akceptacji cementów romańskich jako materiałów do napraw zabytkowych elewacji przez współczesny rynek konserwatorski. Wyjaśnienie mechanizmu pęknięcia zaczynów i zapraw romańskich jest głównym celem promotorskiego projektu badawczego.

Zasadniczym zadaniem badawczym, zrealizowanym w okresie sprawozdawczym, była analiza mikroskopowa siatki skurczowych spękań w zaczynach z cementów romańskich, przy użyciu mikroskopii optycznej oraz skaningowej mikroskopii elektronowej. Badania potwierdziły, że spękania powstają w zaczynach dojrzałych, tj. pielęgnowanych przez 28 oraz 90 dni, podczas gdy struktura zaczynów niedojrzałych nie ulega uszkodzeniu w wyniku skurczu towarzyszącego suszeniu. Badania wykazały występowanie dwóch stref w przekroju poprzecznym próbek różniących się natężeniem spękań. W strefie zewnętrznej zaobserwowano stosunkowo małą ilość spękań, natomiast w strefie rdzenia (środkowej) - ich dużą koncentrację (Rysunek 1). Obserwacja pozwoliła na założenie, że proces suszenia zachodzi w dwóch etapach. W pierwszym etapie, maksymalne naprężenie rozciągające powstaje w warstwie powierzchniowej w wyniku jej zatrzymanego skurczu przez wilgotny rdzeń. Na skutek tego procesu rdzeń doświadcza dużego naprężenia ściskającego, które prowadzi do jego nieodwracalnego stałego odkształcenia plastycznego. W drugim etapie zachodzi wysychanie rdzenia próbki i następuje odwrócenie stanu naprężeń, tj. wewnątrz materiału doświadcza naprężenia rozciągającego w wyniku skurczu zatrzymanego przez wyschniętą warstwę powierzchniową, co prowadzi do spękania środkowej strefy materiału. Strefa ta doświadcza relatywnie dużych względnych zmian wymiarowych, ponieważ w pierwszym etapie uległa efektywnemu zmniejszeniu (ściśnięciu), które stało się jej nowym stanem początkowym. Stąd uszkodzenia fizyczne tego obszaru nasilają się bardziej niż w przypadku równomiernego wysychania próbki. Obecnie prowadzone są pomiary odpowiedzi mechanicznej materiałów na ściskanie w celu weryfikacji przedstawionej interpretacji.

Ponadto, rozpoczęto badania mające na celu porównanie odpowiedzi strukturalnej na wysychanie dla kilku spoiw mogących mieć zastosowanie w pracach konserwatorskich. Skupiają się one na aktualnie produkowanych cementach romańskich, francuskim cemencie naturalnym Prompt oraz wapnie hydraulicznym (NHL5). Wyznaczono składy zaczynów i zapraw charakteryzujące się podobną płynnością, która jest istotną zmienną z punktu widzenia prac konserwatorskich.



Rys. 1. Zdjęcie mikroskopowe w świetle przechodzącym wykonane dla zaczynu pielęgnowanego przez 28 dni w 100% wilgotności względnej. Widoczna jest większa ilość spękań w strefie środkowej zaczynu.

PROJEKTY BADAWCZE "IUVENTUS PLUS"

1. Molekularny mechanizm katalitycznego utleniania węglowodorów przez porfiryny manganu w roztworze i na nośniku

Projekt badawczy Iuventus Plus IP2010 036270 [2010-2011]

(kierownik projektu: dr Dorota Rutkowska-Zbik)

Celem badań było (1) szczegółowe zbadanie molekularnego mechanizmu utleniania węglowodorów (głównie cykloheksenu i propenu - mogących utleniać się do epoksydu, ketonu lub alkoholu), zachodzącego przy udziale porfiryn manganu, jako katalizatorów homogenicznych w różnych rozpuszczalnikach i osadzonych na nośniku oraz (2) określenie parametrów zewnętrznych (rodzaj rozpuszczalnika, nośnik) mogących modyfikować reaktywność badanej grupy związków.

Przedstawione badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą DFT (Teoria Funkcjonałów Gęstości) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z zastosowaniem przybliżenia R_i , zaimplementowanego w programie Turbomole. Badane procesy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań, kąty walencyjne), elektronowych (ładunki) oraz zmian energii towarzyszących poszczególnym etapom badanej reakcji.

W pierwszej kolejności określono mechanizm utleniania cykloheksenu do epoksydu, alkoholu i ketonu – określono poszczególne etapy i obliczono bariery energetyczne. Główny wysiłek skoncentrowany był na określeniu ścieżki utleniania do ketonu, ponieważ ten proces jest najmniej zbadany i opisany w literaturze. Przeprowadzone badania pokazują, że keton powstaje z rodnika cykloheksenyloвого, który reaguje z tlenem okso aktywnej formy katalizatora. Wiązanie C-H znajdujące się w pozycji α w stosunku do wiązania podwójnego ulega aktywacji - atom wodoru migruje na atom tlenu (z grupy okso). W następnym kroku utworzona grupa OH wiąże się do atomu węgla. Powstały sprotonowany keton traci wodór w zetknięciu z cząsteczką donora tlenu lub inną cząsteczką katalizatora.

Następnie rozważono szereg ligandów innych niż ligand okso ($=O$), mogących aktywować węglowodory. Wszystkie zbadane ligandy tlenowe (OOH^- , $HOOH$, OCI^- , OH) wykazują dużą nukleofilowość (całkowity ujemny ładunek, zgromadzony głównie na atomach tlenu). Mogą zatem uczestniczyć w aktywacji wiązania C-H poprzez utworzenie wiązania z atomami C i H. Stwierdzono ponadto, że przyłączenie grupy $HOOH$ powoduje (bez obserwowalnej bariery energetycznej) utworzenie aktywnej formy okso katalizatora. Zbadano również zachowanie liganda chlorkowego w procesie aktywacji węglowodorów: ma on zdolność przyłączania wodoru i tworzenia obojętnej cząsteczki HCl , która oddysocjowuje od centrum aktywnego katalizatora. Właściwości nukleofilowe tego liganda są jednak mniejsze niż ligandów zawierających atomy tlenu.

Na koniec zbadano wpływ rozpuszczalnika na właściwości katalityczne porfiryny manganu. Stwierdzono, że polarne środowisko sprzyja zachodzeniu reakcji epoksydacji cykloheksenu (głównemu procesowi zachodzącemu pod wpływem porfiryn manganu) powodując obniżenie barier reakcji.

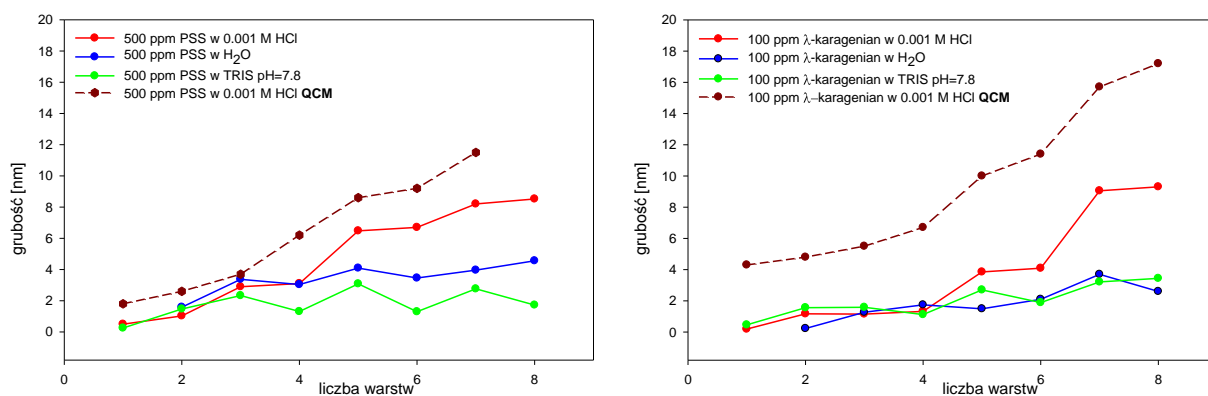
2. Aktywne enzymatycznie wielowarstwowe filmy polielektrolitowe do zastosowań biomedycznych

Projekt badawczy Iuventus Plus [2010-2011]

(kierownik projektu: dr Ewelina Jarek)

Celem projektu, zakończonego w tym roku było opracowanie metodyki uzyskiwania funkcjonalnych filmów polielektrolitowych z wbudowanym białkiem - enzymem z zachowaną aktywnością katalityczną. Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe stanowią rusztowanie i macierz dla białka, a ich właściwości i wewnętrzna struktura powinna zapewnić prawidłowe funkcjonowanie enzymu oraz chronić go przed utratą aktywności biologicznej. Zwiększenie stabilności enzymów i innych substancji biologicznie czynnych ma ogromne znaczenie ze względu na potencjalne, przemysłowe i biomedyczne zastosowania.

Do badań, jako białko modelowe wybrano α -chymotrypsynę (EC 3.4.21.1.) enzym trawienny z grupy proteaz serynowych wydzielany przez trzustkę. Jako polimery wykorzystano polianiony: poli(styrenosulfonian sodu) - PSS oraz λ -karagenian, naturalny polisacharyd izolowany z wodorostów. Warunki tworzenia filmów polimerowo -białkowych optymalizowano w taki sposób, aby uzyskać jak największą zawartość i trwałość enzymu w warstwach. Wiadomo z literatury, że kwaśne środowisko sprzyja zachowaniu właściwości biologicznych białka podczas przechowywania w postaci roztworów, pomiary zeta potencjału wykazały, że w pH=3 białko ma dodatni ładunek ok. 40 mV i może być traktowane, jako polikation. Metodą sekwencyjnej adsorpcji (*ang. layer by layer*) na oczyszczonych płytkach krzemowych modyfikowanych jodkiem poli(etylenoiminy) - PEI tworzą filmy z naprzemiennych warstw polianionu i chymotrypsyny w pH=3 (0.001 M HCl), pH=5.4 (woda) oraz w warunkach optymalnych dla działania enzymu (roztwór buforowy TRIS pH =7.8). Dla warstw nakładanych z wody i roztworu buforowego nie osiągnięto jednak zadawalających przyrostów grubości (Rysunek 1).



Rys.1. Grubości elipsometryczne filmów polielektrolitowych z wbudowaną α -chymotrypsyną w zależności od ilości warstw i warunków nakładania (linie ciągłe) oraz grubość filmów obliczona w oparciu o model viskoelastyczny uzyskana w trakcie eksperymentów z wykorzystaniem mikrowagi kwarcowej (QCM) (linie przerywane)

Dla filmów o największej grubości elipsometrycznej wykonano eksperymenty z użyciem mikrowagi kwarcowej (*ang. Quartz Cristal Microbalance*). Obie metody dały jakościowo zgodne wyniki. Analiza wyników uzyskanych metodą QCM wskazuje na zwartą i sztywną strukturę filmów nakładanych przy pH=3, zmiana środowiska na lekko zasadowe (TRIS o pH 7.8) powoduje rozwarstwienie filmu prawdopodobnie związane ze zmianą konformacji enzymu. Aktywność enzymatyczną białka w filmach polimerowych sprawdzano spektrofotometrycznie w reakcjach rozpadu syntetycznych substratów.

3. Molekularne podstawy oddziaływań pomiędzy jonami wapnia a wybranymi kwasami poliuronowymi

Projekt badawczy Iuventus Plus IP 2010 032370 [2010-2011]

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

W oparciu o wyniki symulacji metodą dynamiki molekularnej oraz badania Monte Carlo/ZINDO-1, zaproponowano nowy model strukturalny opisujący oddziaływania Ca^{2+} -guluronian. Model okazał się dość podobny do tzw. *shifted egg-box model*, zaproponowanego przez Braccini i Péreza, jeśli rozpatrywać sieć wiązań wodorowych w obrębie i pomiędzy łańcuchami poliguluronianów. Jednakże występują istotne różnice, jeśli chodzi o koordynację jonu wapnia. Zgodnie z naszymi wynikami jeden kation Ca^{2+} jest koordynowany przez cztery atomy tlenu należące do dwóch grup karboksylowych (jedna grupa przypada na jeden łańcuch) oraz cztery atomy tlenu należące do czterech cząsteczek wody. Liczba reszt cukrowych przypadająca na jeden kation wapnia jest równa cztery, w pełnej analogii do modelu *egg-box*. Duży wkład wiązań wodorowych sugeruje ich znaczenie w procesie tworzenia kompleksów wapń-guluronian. Ponadto, podkreślono dużą rolę wody w ww. procesie. Otrzymane rezultaty są istotne również dla innych układów typu dwuwartościowy jon metalu/kwas uronowy.

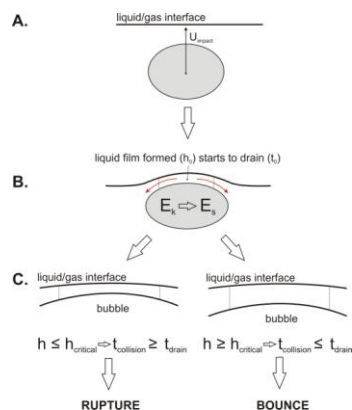
4. Określenie czynników determinujących stabilność ciekłych filmów powstających podczas zderzenia pęcherzyka gazu z różnymi powierzchniami międzyfazowymi

Projekt badawczy Iuventus Plus IP2010 049070 [2010-2011]

(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Projekt na celu uzyskanie nowych danych, które pogłębią wiedzę o zjawiskach związanych z powstawaniem i stabilnością ciekłych filmów tworzących na różnych powierzchniach międzyfazowych w warunkach dynamicznych. Główna część badań dotyczyła powierzchni ciec/gaz. Zderzenia pęcherzyków z powierzchnią monitorowano przy użyciu szybkiej kamery (~1000Hz). Dzięki trzem różnym modyfikacjom zestawu eksperymentalnego, obserwowano zderzenia pęcherzyków gazu z powierzchnią międzyfazową (i) będącą w spoczynku, kiedy kamera rejestrująca zderzenia ustawiona była pod kątem 90° w stosunku do toru lotu pęcherzyka, (ii) będącą w spoczynku, kiedy obiektyw kamery ustawiony był prostopadle do powierzchni międzyfazowej, co pozwoliło na obserwację momentu tworzenia się ciekłego filmu oraz (iii) poddaną kontrolowanym zaburzeniom o znanej częstotliwości i amplitudzie, indukującym na powierzchni fale.

Wykazano, że w jednoskładnikowej cieczy na stabilność ciekłego filmu, powstającego w warunkach dynamicznych podczas zderzenia pęcherzyka z powierzchnią ciec/gaz, największy wpływ ma promień (rozmiar) filmu, czyli cienkiej warstwy cieczy. Wykazano także, że promień filmu determinowany jest energią kinetyczną związaną z ruchem pęcherzyka, podczas uderzenia - wraz ze wzrostem energii kinetycznej promień filmu był większy. Zatem podczas zderzenia pęcherzyka z powierzchnią ciec/gaz do koalescencji może dojść tylko wtedy, kiedy promień powstałego filmu jest na tyle mały, aby ciecz z filmu miała szansę wyciec do krytycznej grubości pęknięcia ($h_{critical}$) podczas trwania zderzenia. Innymi słowy pęcherzyk pęka, kiedy czas wyciekania filmu (t_{drain}), determinowany wielkością jego promienia jest mniejszy niż czas kontaktu pęcherzyk-powierzchnia ($t_{collision}$). W przeciwnym wypadku odbija się on od powierzchni. Dodatkowym, mocnym dowodem na słuszność powyższej hipotezy były eksperymenty, w których wykazano, że gdy rozpraszana w trakcie kolizji energia kinetyczna pęcherzyka była "uzupełniana" z zewnętrznego źródła (poprzez indukowane fale powierzchniowe, które oddają część energii uderzającemu pęcherzykowi) to czas jego "życia" ulegał spektakularnemu wydłużeniu z kilku milisekund do kilku lub kilkunastu minut. Analiza uzyskanych danych dla zderzenia pęcherzyków w czystych cieczach pozwoliła na zaproponowanie ogólnego mechanizmu określającego warunki decydujące o zachowaniu się pęcherzyka (jego stabilności) podczas zderzenia z powierzchnią ciec/gaz (Rysunek 1).



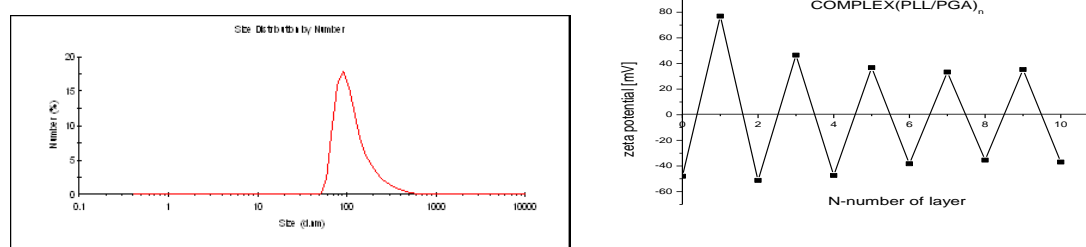
Rys. 1. Mechanizm przedstawiający warunki, które decydują o pęknięciu lub odbiciu pęcherzyka podczas jego zderzenia z powierzchnią międzyfazową ciec/gaz

5. Zastosowanie nanocząstek/nanokapsulek do wcelowanego dostarczenia substancji terapeutycznych

Projekt badawczy Iuventus plus [2010-2011]
(kierownik projektu: dr Krzysztof Szczepanowicz)

Celem niniejszego projektu było opracowanie podstaw naukowych efektywnej metody otrzymywania nanoosiłników substancji aktywnych (m.in. leków, RNA, DNA) oraz opracowanie metody modyfikacji powierzchni tych nanoosiłników/nanokapsulek w celu eliminacji wiązań niespecyficznych. Dzięki takiemu podejściu leki zamknięte w nanoosiłnikach osiągną zdolność wykonania złożonych operacji we właściwym miejscu i czasie w organizmie pacjenta. Nanometryczne rozmiary nośników ułatwiają takie podejście np. w terapii antynowotworowej, obiekty mniejsze niż 10 nm są szybko wydalane z organizmu przez nerki, zaś twory większe niż 100 nm z trudem przemieszczają się wewnątrz guza nowotworowego. Częstki w zakresie 10-100 nm z łatwością wędrują krwioobiegiem nie przenikając przez ściany naczyń krwionośnych większości zdrowych tkanek. Inaczej jest w przypadku naczyń krwionośnych nowotworów, które są nietypowo podziurawione porami, przez które cząstki takie mogą swobodnie przedostawać się do otaczającej je tkanki gromadząc się w guzie, nie wpływając na inne zdrowe części organizmu, zminimalizuje jedną z największych słabości preparatów leczniczych, czyli czasoprzestrzenną nieselektywność, umożliwi wyeliminowanie poważnych skutków ubocznych stosowanych terapeutyków na skutek ich toksycznego działania w całym organizmie.

W projekcie skupiono się na rozwinięciu dwóch metod preparatyki nanoosiłników zawierających czynniki aktywne. Metoda pierwsza polegała na enkapsulacji kropli emulsyjnej zawierającej czynnik aktywny w powłokach polielektrolitowych. Otrzymano emulsje o średnim rozmiarze kropelek 100 nm, które to następnie zamykano w powłokach polielektrolitowych metoda warstwa po warstwie. Druga metoda polegała na tworzeniu kompleksów makromolekularnych (polikation/polianion) (średni rozmiar 100 nm) które to następnie zamykano w powłokach polielektrolitowych metoda warstwa po warstwie. Rysunek 1 przedstawia wielkości kapsulek otrzymanych metodą drugą oraz wykres zależności potencjału zeta od ilości warstw nałożonego polielektrolitu.



Rys. 1 a) Średni rozmiar wielkości nanokapsulek-kompleksu PLL/PGA,
b) zależności potencjału zeta od ilości warstw nałożonego polielektrolitu

Otrzymane nanoosiłniki poddano modyfikacji (pegylacji) w celu eliminacji niespecyficznej adsorpcji białek.

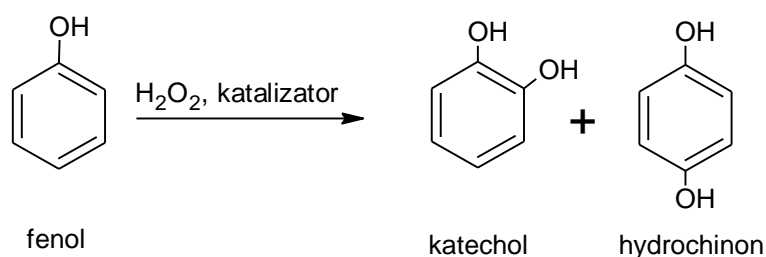
6. Wpływ rodzaju centrum aktywnego i struktury ligandu makrocyklicznego na aktywność katalityczną metalokompleksów w reakcji utleniania fenolu w fazie ciekłej

Projekt badawczy Iuventus Plus IP2010 016970 [2010-2011]

(kierownik projektu: mgr Robert Karcz)

Utlenianie fenolu to proces interesujący zarówno z punktu widzenia otrzymywania produktów istotnych dla zastosowań w przemyśle chemicznym i farmaceutycznym, jak i ze względu na jego znaczenie dla eliminacji zanieczyszczeń środowiska naturalnego. Jedną z metod przydatnych zarówno dla ochrony środowiska, jak i syntezy cennych związków jest biomimetyczne utlenianie, przy użyciu ekologicznego utleniacza, jakim jest nadtlenek wodoru.

Celem pracy była synteza rozpuszczalnych w wodzie kationowych i anionowych kompleksów porfiryńowych i ftalocyjaninowych żelaza manganu oraz kobaltu. Otrzymane metalokompleksy zostały scharakteryzowane przy pomocy spektroskopii UV-Vis i użyte jako katalizatory reakcji utleniania fenolu do katecholu i hydrochinonu (Rysunek 1).

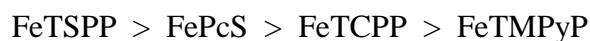


Rys. 1. Schemat badanej reakcji

Reakcję prowadzono w fazie ciekłej w temperaturze 80°C z użyciem stechiometrycznej ilości nadtlenku wodoru jako utleniacza. Wszystkie spośród otrzymanych metalokompleksów wykazały aktywność w badanej reakcji. Na podstawie uzyskanych wyników kompleksy zawierające sulfonowany ligand ftalocyjaninowy można uporządkować w następujący szereg aktywności :



Dalsze badania aktywności katalitycznej prowadzono dla kompleksów żelaza z różnymi ligandami makrocyklicznymi. Na podstawie uzyskanych wyników kompleksy zawierające żelazo można uporządkować w następujący szereg aktywności:



Stwierdzono, że zarówno struktura ligandu, jak i rodzaj centrum metalicznego ma wpływ na własności katalityczne katalizatorów. Wszystkie kompleksy rozpuszczalne w wodzie wykazały wysoką aktywność. Spośród kompleksów zawierających sulfonowane ligandy makrocykliczne (TSPP i PcS) wyższą aktywność wykazały te zawierające ligand porfiryńowy. Ponadto wszystkie kompleksy anionowe (TSPP, PcS, TCPP) wykazały wyższą aktywność niż kompleks kationowy (TMPyP). Najwyższą selektywność do katecholu uzyskano w reakcji prowadzonej w obecności katalizatora FeTCPP.

7. Nowe białkowe układy warstwowe

Projekt badawczy Iuventus Plus [2010-2011]

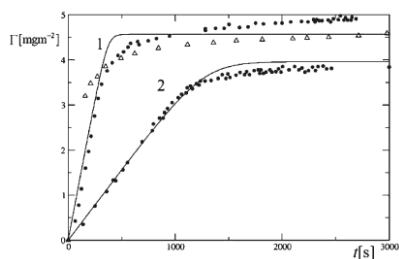
(kierownik projektu: dr inż. Jakub Barbasz)

Projekt był realizowany zgodnie z harmonogramem. Przeprowadzono symulacje komputerowe tworzenia filmu białkowego metodami dynamiki molekularnej oraz w oparciu o algorytm RSA.

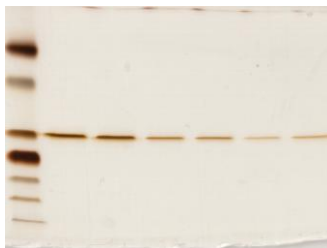
Określono zmiany struktury filmu białkowego w zależności od parametrów środowiska. Wykazano, iż opisywane w literaturze duże rozbieżności w maksymalnych pokryciach fibrynogenem (od $2.27 \cdot 10^3 \text{ N}/\mu\text{m}^2$ do $6.13 \cdot 10^3 \text{ N}/\mu\text{m}^2$) da się wyjaśnić z użyciem zbudowanego modelu matematycznego.

Stworzono model matematyczny opisujący kinetykę procesu adsorpcji białka w zależności od warunków prowadzenia procesu (wykres).

Przeprowadzono pomiary dla filmu białkowego utworzonego z dwóch białek o odmiennej budowie (globularnego i liniowego) osadzanych kolejno na powierzchni.



Kinetyka adsorpcji fibrynogenu. Porównanie wyników doświadczalnych dla różnych stężeń, z krzywymi teoretycznymi. Punkty - wyniki eksperymentalne, linie ciągłe - krzywe teoretyczne.



Elektroforeza żelowa - czysty fibrynogen

8. Mechanizm reakcji redukcji tlenków azotu węglowodorami, katalizowanej mordenitem dotowanym palladem. Symulacje kwantowo-chemiczne

Projekt badawczy Iuventus Plus [2010-2011]

(kierownik projektu: dr Robert Gryboś)

Ustalenie mechanizmu reakcji, szczególnie tak skomplikowanej jak katalityczna redukcja tlenków azotu, jest dużym wyzwaniem dla metod teoretycznych. Z drugiej strony, ograniczenia metod eksperymentalnych w badaniu reakcji *in situ* sprawiają, że teoria jest często jedynym narzędziem, którego można użyć.

Usuwanie tlenków azotu z gazów wylotowych silników spalinowych jest ważnym zagadnieniem z praktycznego punktu widzenia. Coraz ostrzejsze normy wprowadzane w Unii Europejskiej wymagają stosowania coraz bardziej zaawansowanych katalizatorów deNO_x, jak na przykład zeolity dotowane metalami szlachetnymi. Jednym z najbardziej obiecujących układów jest mordenit dotowany palladem - wykazuje dużą aktywność przy jednoczesnej sporej odporności na gorącą parę wodną.

Tradycyjny proces NO-SCR, stosowany w katalizatorach stacjonarnych źródeł NO (piece, spalarnie) polega na redukcji NO przy użyciu amoniaku. Ze względów praktycznych ten system nie jest stosowany w pojazdach mechanicznych, poza niektórymi modelami silników Diesla firmy Mercedes, w których źródłem amoniaku jest mocznik (tzw. technologia AdBlue). W pozostałych katalizatorach amoniak jest wytwarzany na samym katalizatorze z węglowodorów - paliwa dostarczanego przez by-pass. W układach modelowych jako paliwo podaje się metan.

Mechanizm oparty na przesłankach eksperymentalnych został podany przez Shimizu i Okadę, jednak jest on zbyt ogólny i w niektórych miejscach zdecydowanie niejasny. Stosując metody chemii kwantowej (periodyczną metodę DFT) przeprowadziłem symulacje szeregu etapów reakcji deNO_x takich jak adsorpcja NO, CO, CO₂, O₂, CH₄, CH₃, CH₅⁺, NH₃, NH₄⁺, H₂O, HNO na izolowanych centrach palladowych; aktywacja metanu; hydroliza grupy CN; reakcja NO z jonem amoniowym. Mechanizm aktywacji metanu nie został ustalony. Cząsteczka CH₄ nie oddziałuje z centrum kwasowym co, w innym wypadku, mogłoby prowadzić do powstania kationu karbeniowego CH₅⁺ jako prekursora rozerwania wiązania C-H. Adsorpcja małych cząsteczek na centrum palladowym powoduje znaczące osłabienie wiązań pomiędzy metalem a szkieletem zeolitowym, co prowadzi do wzrostu mobilności, a w konsekwencji do obserwowanego eksperymentalnie spiekania izolowanych centrów palladu w klastery metaliczne. Protony wykazują większe powinowactwo do centrum palladowego niż do szkieletowych atomów tlenu i tworzenia klasycznych centrów kwasowych Brønsteda.

Zastosowanie zestawu 16 położeń palladu w komórce elementarnej mordenitu pokazało także, jak bardzo właściwości centrum metalicznego zależą od otoczenia. Dobrym przykładem jest stwierdzenie samorzutnej (bez bariery) dysocjacji wiązania O—O w cząsteczce tlenu zaadsorbowanej na Pd znajdującym się w jednym, specyficznym położeniu.

KRAJOWE SIECI BADAWCZE

2. SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(koordynator sieci: prof. dr hab inż. Piotr Warszzyński)

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

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

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

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

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

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

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(kierownik tematu: dr Robert Socha)

Zwiększone zapotrzebowanie przemysłu oraz gospodarstw domowych na energię oraz konieczność dostosowania się do wymagań odnośnie emisji CO₂, powodują, że "czysta" energia uzyskiwana z ogniw fotowoltaicznych zyskuje na znaczeniu. Zastosowanie nanotechnologii w pracach nad ogniwami tzw. trzeciej generacji wydaje się w tym aspekcie znaczące. 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 sieci, w 2011 roku, IkiFP PAN dostarczał testowe próbki związków mogących służyć jako katalizatory procesu trawienia płytek krzemowych oraz jako substancje zwiększające wewnętrzny współczynnik odbicia światła w ogniwie. Ponadto zostały wykonane testy układów z naniesionymi na powierzchnię nanocząstkami i nanodrutami srebra w matrycy dielektrycznej TiO_x. Wstępne wyniki pomiarów efektu fotoelektrycznego na badanych powierzchniach pokazały wysokie wzmocnienie fotoprądu po zastosowaniu nanocząstek srebra..

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

Krajowa sieć badawcza MNiSzW

(kierownicy tematu: prof. dr hab inż. Piotr Warszyński, prof. dr hab. 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 interfezy biomolekuła (błona) – nanowarstwa, wniesie istotny wkład w wiedzę niezbędną do świadomego modelowania układów o wymaganej dynamice molekularnej oraz powinowactwie do określonych struktur.

Przedmiotem działania sieci naukowej BIONAN jest:

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

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

PROJEKTY BADAWCZE ZAMAWIANE

1. Sorbent nanostrukturalny do likwidacji skażeń chemicznych

Projekt rozwojowy 0R00003605 [2010-2011]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Projekt ma na celu wdrożenie wyników badań prowadzonych uprzednio w ramach projektu badawczego 0 T00C 01827 oraz projektu rozwojowego 0R00003605, poświęconych opracowaniu nanostrukturalnego odkażalnika proszkowego zapewniającego rozkład bojowych środków trujących oraz opracowaniu oprzyrządowania umożliwiającego prowadzenie odkażania. Jest realizowany był przez konsorcjum utworzone przez Wojskowy Instytut Chemii i Radiometrii, IKiFP PAN, przedsiębiorstwo "RAVIMED" i przedsiębiorstwo "ADAL". Receptura nanostrukturalnego odkażalnika została opracowana przez IKiFP PAN. Prace prowadzone w ramach projektu w IKiFP PAN obejmowały:

- uzupełniające badania laboratoryjne nanostrukturalnego odkażalnika pod kątem maksymalizacji jego efektywności,
- opracowanie technologii syntezy nanoodkażalnika w skali półtechnicznej.

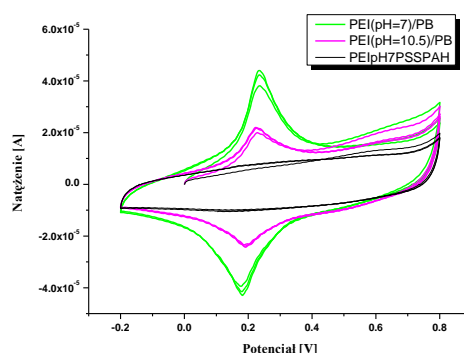
PROJEKTY "HOMING PLUS" (FNP)

1. Struktura i właściwości elektryczne filmów kompozytowych zawierających przewodzące nanocząstki

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

(kierownik projektu: dr Marta Kolasińska-Sojka)

W ramach prowadzonych prac badano wpływ stopnia naładowania warstwy polietylenoiminy (PEI), na której adsorbowano cząstki błękitu pruskiego (PB). Ponieważ polietylenoimina należy do słabych elektrolitów, jej stopień dysocjacji zależy od pH roztworu i maleje ze wzrostem zasadowego charakteru roztworu. Badano przypadek mocno zdysocjowanej PEI (w pH=7) oraz w pH=10.5, w których to warunkach jest ona słabiej naładowana. Okazało się, że ilość błękitu zaadsorbowanego na warstwie PEI osadzanego z pH=7 jest dwukrotnie mniejsza w porównaniu do osadzania na warstwie PEI tworzonej z roztworu o pH=10.5. Morfologię omawianych nanokompozytów badano przy użyciu AFM. Z analizy zdjęć AFM wynika, iż cząstki PB osadzone na warstwie PEI adsorbowanej z roztworu o pH=7 zachowują swoją wielkość (rozmiar zbliżony do mierzonego dla zawiesiny nanocząstek: ok.10 nm). Natomiast średnia wielkość osadzonych cząstek PB na warstwie PEI adsorbowanej z roztworu o pH=10.5 jest ponad 3 razy większa, mimo iż osadzanie prowadzone jest z takiej samej zawiesiny cząstek PB, o średniej wielkości ok. 10 nm. W drugim z omawianych przypadków na powierzchni PEI tworzone są agregaty PB. Woltamperometria potwierdziła znaczący wpływ rodzaju warstwy zakotwiczonej na aktywność elektrochemiczną badanych filmów. W przypadku filmów, gdzie warstwa błękitu jest osadzona na warstwie PEI, adsorbowanej na złotej elektrodzie z roztworu o pH=10.5, wartości prądów, zarówno utleniania, jak i redukcji, są dwukrotnie mniejsze niż w przypadku błękitu na PEI osadzonej z roztworu o pH=7 (Rysunek 1), choć ilość osadzonego błękitu jest tu ok. dwukrotnie większa. Prawdopodobnie wynika to z faktu tworzenia się agregatów błękitu pruskiego na powierzchni PEI o pH=10.5, które powodują zmniejszenie powierzchni właściwej błękitu pruskiego, a co za tym idzie – zmniejszenie aktywności elektrochemicznej o ok. 50%. O tym, że aktywność elektrochemiczna pochodzi wyłącznie od obecnego błękitu pruskiego świadczą woltamperogramy zmierzone dla filmów polielektrolitowych bez dodatku błękitu pruskiego (czarna krzywa na Rysunku 1).



Rys. 1. Woltamperogramy złotej elektrody modyfikowanej dwuwarstwą PEI/PB, dla PEI adsorbowanego z roztworów o pH=7 (krzywa zielona) lub pH=10,5 (krzywa różowa); dodatkowo + woltamperogram dla trzywarstwowego filmu polielektrolitowego (krzywa czarna).

W celu wyjaśnienia różnic w osadzaniu cząstek błękitu na obu typach warstwy PEI zbadano grubości i właściwości optyczne dla monowarstw PEI osadzanych z roztworów o dwóch wspomnianych wartościach pH. Grubości obu rodzajów monowarstw są zbliżone (ok.1.4 nm). Zaobserwowano natomiast różnice w przebiegu współczynnika załamania światła w zależności od długości fali, co może być spowodowane różnicą gęstości monowarstw.

PROJEKTY "POMOST" (FNP)

1. Selektowna hydrogenoliza gliceryny do glikoli *via* acetol na katalizatorach heterogenicznych zawierajacych metale i tlenki metali

Projekt Pomost (FNP) 2011-3/7 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Katarzyna Samson)

Umowa o dofinansowanie projektu pt. "Selektowna hydrogenoliza gliceryny do glikoli *via* acetol na katalizatorach heterogenicznych zawierajacych metale i tlenki metali" zostala podpisana z Fundacja na rzecz Nauki Polskiej 11.11.2011.

W ciagu niecalych dwuch miesiacy obecnego okresu sprawozdawczego:

- a) wykonano prace biurowo - administracyjne niezbedne do formalnej realizacji projektu (np. wymagane opisy i oznakowania faktur logami FNP, UE i IG),
- b) zamowiono i zakupiono czesc zaplanowanej w pierwszym okresie sprawozdawczym aparatury laboratoryjnej (pehametr firmy WTW),
- c) zamowiono i zakupiono odczynniki chemiczne niezbedne do syntezy katalizatorow,
- d) rozpoczeto szczegolowy przeglad literaturowy dotyczacy badanej reakcji, zwlaszcza pod katem stosowanych metod preparatyki katalizatorow oraz konkretnych warunkow aparaturowych, jakich wymaga reakcja selektywnej hydrogenolizy gliceryny.

PROJEKTY 6. PROGRAMU RAMOWEGO UE

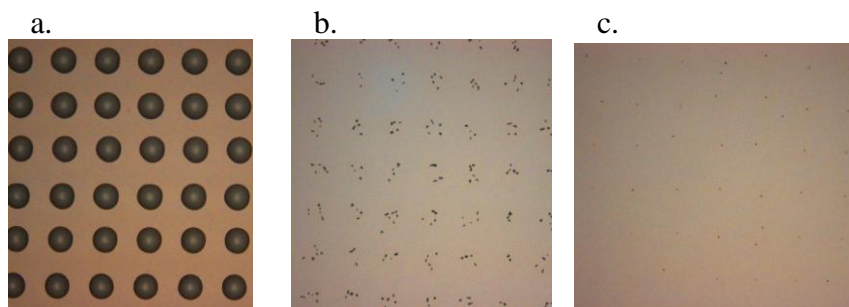
1. PARFUN Nanoscale Surface Treatments to Functionalise Polymer Particles for Electronic Applications



EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt SPR PARFUN [2008-2011]
(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński)

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

Celem naszego udziału w projekcie jest rozwinięcie metod modyfikacji powierzchni szkła i/lub płytek plastikowych (poliimidowych - PI) w sposób pozwalający na lepszą adhezję mikronowych, polistyrenowych cząstek do tych powierzchni według zaprojektowanego wzoru. Do powierzchniowej modyfikacji płytek użyty został kationowy polielektrolit - polietylenoimina (PEI) o masie molowej 700 kD, który był adsorbowany na płytkach szklanych lub poliimidowych z roztworów: wody, etanolu lub izopropanolu o stężeniach PEI 500 ppm poprzez za pomocą metody mikro nanoszenia kontaktowego (microcontact printing) oraz adhezji cząstek lateksowych, dostarczonych przez firmę Conpart, z zawiesin etanolu i izopropanolu. W roku 2011, na podstawie przeprowadzonej optymalizacji właściwości powierzchniowych i parametrów reologicznych mieszanin w LCD Centre opracowano metodę nanoszenia PEI na powierzchniach PI oraz szkła metodą Ink Jet Printing. Do nanoszenia zastosowano głowice XAAR XJ126/50 ze 126 aktywnymi dyszami. Użyto roztworów: 15% etanolu w izopropanolu i 15% etanolu w glikolu etylenowym zawierające PEI o masie cząsteczkowej 70 kD oraz 750 kD. Rysunek 1a ilustruje przykładowe tworzenie jetu roztworu PEI w procesie Ink Jet Printing. Nie stwierdzono zależności wielkości oraz kształtu kropli od masy cząsteczkowej użytego polikationu. Następnie na tak przygotowanych powierzchniach ze wzorem pokrytym PEI osadzano cząstki lateksowe AA028 z zawiesiny izopropanolowej o różnych stężeniach cząstek metodą "dip coating". Zaobserwowano osadzanie cząstek w ściśle określonych miejscach, pokrytych PEI. Gęstość pokrycia zależała od stężenia cząstek



Rys 1. a. Obraz kropli Eth+GEt zawierających PEI na powierzchni płytek szklanych,
b., c. - cząstki lateksowe AA028 osadzone z zawiesiny o różnym stężeniu

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

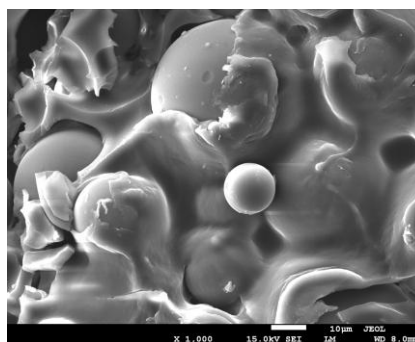
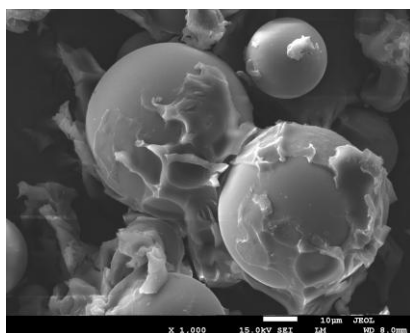
EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt SPR NANOREP II [2008-2011]
(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński)

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

W roku 2011 kontynuowano badania mające na celu optymalizację metody modyfikacji powierzchni szklanych kulek i nanocząstek krzemionkowych pod kątem kompatybilności z powłokami polimerowymi i tworzywami termoplastycznymi. Dokonaliśmy wyboru pochodnych silanowych celem modyfikacji powierzchni szkła lub krzemionki. W celu podniesienia odporności polimerów na zarysowanie nano- lub mikrocząstki powinny być wbudowane w strukturę polimeru, czyli powinny posiadać grupy funkcyjne umożliwiające ich chemiczne wiązanie. W poniższej tabeli zebrano wybrane pochodne silanowe dobrane pod kątem zastosowania do powłok akrylowych, akrylowo-poliuretanowych, epoksydowych oraz poliamidu 6.

No.	SILANE	Symbol	Density	Molecular weight
ACRYLIC	SIA0200.0 (3-ACRYLOXYPROPYL)TRIMETHOXYSILANE	ACS	1.06	234.32
PU- ACRYLIC	SI16455.0 3-ISOCYANATOPROPYLTRIETHOXYSILANE	CYS	0.99	247.32
EPOXY	SIA0610.0 3-AMINOPROPYLTRIETHOXYSILANE	AMS	0.95	221.37
EPOXY	SIG5840.0 (3-GLYCIDOXYPROPYL)TRIMETHOXYSILANE	GPS	1.07	236.34
PA6	SIA0591.0 N-(2-AMINOETHYL)-3-AMINOPROPYLTRIM-ETHOXYSILANE	AES	1.01	226.36
PA6	N-[5-(TRIMETHOXYSILYL)-2-AZA-1-OXOPENTYL]CAPROLACTAM, 95%	CAS	1.14	318.4

Kompatybilność zmodyfikowanych szklanych mikrosfer była weryfikowana poprzez pomiar zmian zwilżalności oraz obrazowanie SEM. Rysunek 1 przedstawia różnice w obrazach niemodyfikowanych i modyfikowanych mikrosfer w powłoce akrylowej.



Rys. 1. Obrazy SEM mikrosfer szklanych w powłoce akrylowej. Po lewej - mikrosfery niemodyfikowane, po prawej - modyfikowane silanem ACS.

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. dr hab. 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. 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) "Opracowanie zaawansowanych katalizatorów". Celem prowadzonych przez IKiFP PAN prac jest zaprojektowanie, synteza, charakteryzacja oraz katalityczne testowanie nowych katalizatorów dla reakcji dopalania metanu w gazach wydechowych silników CNG, w oparciu o mieszane tlenki metali przejściowych.

W 2011 głównym celem było przygotowanie większej szarży katalizatora drugiej generacji oraz prace nad dalszą optymalizacją katalizatora. Formuła katalizatora drugiej generacji została opracowana na podstawie wyników poprzednio uzyskanych wyników, które wskazywały, że dodatek niewielkiej ilości palladu na etapie syntezy prekursora hydrotalkitowego daje efekt synergistyczny poprawiając aktywność zarówno składowej hydrotalkitowej, jak i palladowej. Próby dalszego udoskonalenia katalizatora polegały na a) modyfikacji nośnika, b) modyfikacji procedury syntezy katalizatora hydrotalkitowego, b) modyfikacji sposobu syntezy w kierunku zwiększenia powierzchni właściwej odpornych termicznie faz mieszanych tlenków. Wykazano, że szczególnie korzystna jest zmiana procedury syntezy katalizatora hydrotalkitowego na etapie impregnacji nośnika. Tak otrzymany katalizator na osnowie mieszanych tlenków Cu-Mn wykazywał aktywność wyższą niż dotowana palladem próbka katalizatora drugiej generacji.



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

Projekt EC 7th FP NEXT-GTL (IP) [2008-2011]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Małgorzata Witko)

Synteza i opis właściwości fizykochemicznych heteropolikwasów

Układy heteropolikwasów należą do grupy związków dwufunkcyjnych ze względu na posiadane właściwości kwasowo-zasadowe i redoksove, których względny udział może być kontrolowany poprzez odpowiednią modyfikację struktury tych układów. W badaniach eksperymentalnych jako podstawę do dalszych modyfikacji wybrano posiadający silne właściwości kwasowe kwas fosforododekawolframowy i znany z silnych właściwości redoksowych kwas fosforododekamolibdenowy. Dodatkowo zsyntezowano i przy użyciu pełnego spektrum technik (XRF, XRD, BET, FTIR, TPR) scharakteryzowano układy fosforowolframowe, w których jeden z atomów addenda (W) został zastąpiony wanadem (V), jako elementem zwiększającym funkcję redox.

Struktura elektronowa heteropolikwasów

Modelowanie teoretyczne koncentrowało się na opisie właściwości utleniających heteropolikwasów. Ponieważ właściwości katalityczne HPA jako katalizatorów w reakcjach utleniania zależą silnie od zdolności do dostarczania tlenu jako reagenta, dlatego w obliczeniach modelowano powstawanie wakacji tlenowych. Wakacje tlenowe modelowano poprzez usunięcie jednego z atomów/jonów tlenu z różnych pozycji strukturalnych anionu Keggina. Obliczenia pokazały, że do najbardziej stabilnej energetycznie struktury prowadzi usunięcie tlenu w postaci jonu O^- . Jak wynika z analizy obliczeń, centra tlenowe są bardzo mocno związane w anionie Keggina, znacznie łatwiej można je usunąć w obecności wodoru (w postaci OH lub H_2O). Wyniki obliczeń pokazały, że energia tworzenia wakacji tlenowej zależy od jego położenia w strukturze. Znacznie łatwiej jest utworzyć wakację z udziałem tlenu mostkowego (łączycego dwa atomy addenda) niż z tlenu skoordynowanego pojedynczo z atomem metalu. W obliczeniach zbadano również wpływ charakteru chemicznego atomów addenda (W, Mo, V, Cu) na energię tworzenia wakacji tlenowych. Wyniki modelowania wskazują, że sąsiedztwo miedzi ułatwia usunięcie tlenu z anionu Keggina.

Struktura elektronowa $MoOxCy$

Badania struktury oksokarbidek koncentrowało się na modelowaniu procesu aktywacji metanu i jego dalszej transformacji do C_2H_4 w układzie $MoO_3/ZSM-5$. Bazując na mikrokinetycznym modelu uzyskanym przez partnera projektu (University of Ghent) do obliczeń użyto małych klastrów molibdenowo-tlenowych, na których przeprowadzono proces adsorpcji metanu i jego dalszą modyfikację. Scharakteryzowano produkty przejściowe i wyznaczono bariery reakcji. Wyniki obliczeń wskazują, że pierwszym etapem reakcji jest fizysozpcja metanu na klastrach Mo-O. W kolejnym etapie następuje aktywacja i zerwanie wiązania C-H. Proces przebiega łatwiej na klastrach zredukowanych, w obecności wakacji tlenowej. W takim przypadku powstałe produkty aktywacji, CH_3 i H są związane z katalizatorem, na centrum metalicznym. W kolejnym etapie dochodzi do zerwania drugiego wiązania C-H i w rezultacie do utworzenia cząsteczki H_2 , która desorbuje z powierzchni katalizatora. Powstała grupa CH_2 jest związana wiązaniem podwójnym z centrum molibdenowym. Obliczenia wskazują, że etylen może tworzyć się poprzez rekombinację dwóch takich grup. Wyznaczona bariera takiej reakcji wynosi 24 kcal/mol. Desorpcja etylenu z powierzchni katalizatora wymaga dostarczenia około 44 kcal/mol i związana jest dodatkowo ze zmianą multipletowości układu.

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



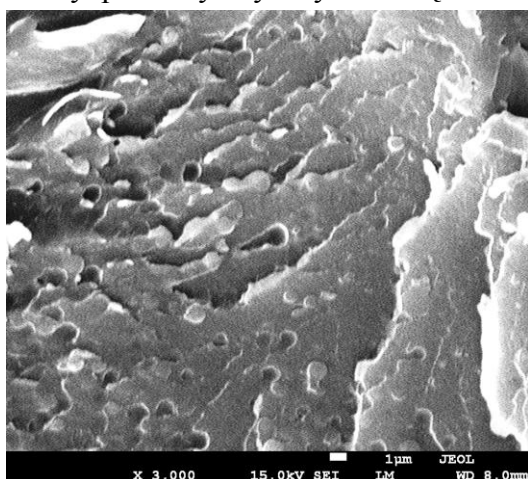
Projekt EC 7th FP NMP3-LA-2008-214261 MUST (CP) [2008-2012]
(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński)

Destruktywny wpływ środowiska i powodowana korozją degradacja stanowią poważny problem ograniczając czas użytkowania pojazdów oraz ich komponentów. Najbardziej rozpowszechnioną i równocześnie najtańszą metodą ochrony elementów metalowych i plastikowych polepszającą ich odporność i przedłużającą czas użytkowania jest ich pokrywanie warstwami polimerów organicznych. Przedmiotem projektu MUST są nowe aktywne powłoki antykorozyjne o wielokierunkowym działaniu ochronnym dla przyszłościowych materiałów konstrukcyjnych do pojazdów różnych typów oparte na warstwach polimerowych zawierających kapsułki z czynnikami antykorozyjnymi lub cząstki wykazujące właściwości spowalniania dyfuzji poprzez warstwę. Przedmiotem badań prowadzonych w IkiFP PAN w roku 2011 było opracowanie modelu matematycznego opisującego dyfuzję wody oraz innych czynników korozyjnych w warstwach polimerowych oraz jego weryfikacja doświadczalna.

Wykorzystując metodę różnic skończonych opracowano zestaw programów komputerowych umożliwiających symulację cyfrową dyfuzji czynników korozyjnych w warstwach polimerowych zawierających cząstki wiążące takie czynniki oraz obliczanie współczynników dyfuzji z danych doświadczalnych.

Stworzony model matematyczny sprawdzono doświadczalnie dla przypadku dyfuzji wody poprzez warstwę polimerową zawierającą zdyspergowane w niej cząstki mające własność wiązania wody. Użyto kulistych cząstek o średnicy 0.55 μm otrzymanych w jednej z partnerskich instytucji programu MUST. Cząstki te otrzymywano w dwustopniowym procesie obejmującym syntezę kulistych cząstek kwasu polimetakrylanowego metodą destylacji - strącania - polimeryzacji, a następnie zobojętnienie grup karboksylowych wodorotlenkiem sodu. Jako osnowy polimerowej użyto wodorozcieńczalnej żywicy epoksydowej przygotowanej w jednej z partnerskich instytucji programu MUST. Dyfuzję wody w tak przygotowanych powłokach polimerowych badano metodą spektrometrii IR ATR oraz przy pomocy mikrowagi.

Opracowany model matematyczny przewiduje, że najlepsze działanie spowalniające dyfuzję wody powinny wykazywać cząstki o wysokiej zdolności sorpcyjnej względem wody i niskim współczynniku dyfuzji. Zastosowane cząstki absorbowaly wodę w ilości równej 180% ich wagi a współczynnik dyfuzji wody w materiale tworzącym cząstki był 5 rzędów wielkości niższy niż w żywicy stanowiącej osnowę warstwy. Pomiar w pełni potwierdziły przewidywania teoretyczne. Powłoki wykonane z kompozytu zawierającego tylko 5% wagowych cząstek pochłaniających wodę wykazywały efektywny współczynnik dyfuzji wody trzy razy mniejszy niż czysta żywica.



Rys. 1. Przekrój przez warstwę żywicy z cząstkami - obraz (SEM)



4. SMOOHS Smart Monitoring of Historic Structures

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

Głównym celem projektu jest opracowanie bezprzewodowego systemu monitorowania obiektów zabytkowych, który będzie używany przez konserwatorów w warunkach terenowych. System posiada modułową strukturę, dzięki czemu możliwe jest dobieranie systemów monitorujących i kombinacji czujników pod kątem odpowiedzi na specyficzne problemy związane z badanym obiektem. Podczas trzeciego roku trwania projektu specjalny nacisk położono na testowanie opracowanych systemów monitorujących oraz upowszechnianie wyników projektu.

We współpracy z partnerami z Uniwersytetu w Bolonii metodę emisji akustycznej zastosowano do monitorowania mikro-pęknięcia elementów drewnianych konstrukcji. W większości materiałów o budowie krystalicznej (głównie metali) sygnały emisji akustycznej nie są rejestrowane podczas obciążania materiału dopóki naprężenia nie przekroczą wartości osiągniętej w poprzednich cyklach obciążających. Ta zdolność "zapamiętywania" najwyższego poziomu naprężenia wywieranego na materiał w przeszłości zwana jest efektem Kaisera. Badanie efektu Kaisera w materiałach organicznych, takich jak drewno, jest bardzo złożone ze względu na wyraźne właściwości lepko-sprężyste, które prowadzą do wymazywania, z biegiem czasu, pamięci w tym materiale. Pozyskanie 150-letni belek drewnianych z dachu zabytkowego budynku umożliwiło poprzez pomiar emisji akustycznej przeprowadzenie nieniszczących badań odpowiedzi historycznego drewna poddawanego cyklicznemu obciążaniu. Przeprowadzone badania wykazały istnienie krótko czasowego efektu Kaisera w badanych próbkach. Ponadto pomiary przeprowadzone po roku wykazały trwałość efektu Kaisera w tym okresie. Eksperymentalna weryfikacja istnienia efektu Kaisera dla historycznego drewna otworzyła nowe perspektywy dla ustalenia historii obciążenia drewnianych dzieł sztuki i budowli, informacji niezwykle istotnej dla oceny ryzyka uszkodzenia mechanicznego tych obiektów.

Najważniejszymi narzędziami rozpowszechniania wyników projektu były opracowane w ramach pakietu roboczego nr 7, koordynowanego przez Instytut: internetowa skrzynka narzędziowa oraz wytyczne konserwatorskie. Internetowa skrzynka narzędziowa zawiera informacje na temat inteligentnych systemów monitorowania, które są nieniszczące, minimalnie inwazyjne i zdolne do pracy w warunkach terenowych. Inteligentne techniki diagnostyczne i czujniki przedstawione w skrzynce narzędziowej pozwalają ocenić integralność strukturalną obiektów, ostrzegają przed niebezpieczeństwem ich fizycznego uszkodzenia, pomagają zrozumieć związek między rozwojem uszkodzeń i wywołującymi je czynnikami środowiskowymi, przez co pomagają zwiększyć szeroko rozumianą ochronę obiektów historycznych. Opracowane wytyczne konserwatorskie są wynikiem trzech lat badań i prac wdrożeniowych. Wytyczne te zawierają informacje o konkurencyjnej i prostej w użyciu bezprzewodowej technologii monitorowania, minimalnie inwazyjnych procedurach montażu i instalacji czujników, ich długoterminowej stabilności, oraz zintegrowanej analizie danych i metodach ich interpretacji. Celem wytycznych jest dostarczenie pełnej i przydatnej praktycznej informacji dla wszystkich zainteresowanych diagnozowaniem i ochroną dziedzictwa architektonicznego. Wszystkie osiągnięcia projektu SMOOHS zostały podsumowane podczas zorganizowanej przez Laboratorium Rathgena (Muzeum Narodowe w Berlinie) końcowej międzynarodowej konferencji która odbyła się w dniach 26-27 września 2011.

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

Projekt EC 7th FP 226898 ROCARE (CP) [2009-2012]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Roman Kozłowski)



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

W okresie sprawozdawczym zakończono kolejny etap wyjaśniania mechanizmu spękań skurczowych zaczynów i zapraw romańskich, którego określenie jest głównym zadaniem badawczym instytutu. Wykorzystano technikę Emisji Akustycznej (EA) do bezpośredniego monitorowania rozwoju spękań wywołanych niejednorodnym schnięciem materiałów. Uzyskano dobrą korelację wyników ze skurczem materiałów i ich właściwościami mechanicznymi podczas rozciągania, które zmieniają się w zależności od struktury porów powstającej po różnych czasach hydratacji. Nieliczne zdarzenia akustyczne o niskiej energii zarejestrowano dla materiałów niedojrzałych, o strukturze szerokoporowatej i niskim skurczu. Odwrotnie, dużą liczbę zdarzeń o wysokiej intensywności odnotowano dla materiałów dojrzałych, o zwartej mikrostrukturze. Przy pomocy pomiarów EA określono dokładną kinetykę pęknięcia, która wskazała na najbardziej intensywne uszkodzenia w czasie gwałtownego skurczu po 6-9 dni schnięcia.

Mechanizm spękań skurczowych ustalony w laboratorium stał się podstawą obszernego programu badań nad praktycznym stosowaniem zapraw na ceglanej ścianie testowej w warunkach zewnętrznych, przeprowadzonym wspólnie z partnerami projektu pracującymi w obszarze praktycznej konserwacji zabytków. Badane mieszanki odpowiadały zaprawom stosowanym do tynkowania i odlewów. Testy praktyczne pozwoliły na optymalizację przygotowania i stosowania zapraw, wyjaśnienie wpływu rzeczywistych warunków dojrzewania, w których pojawiają się duże wahania temperatury i wilgotności względnej oraz odciągnięcie wody przez podłoże wątku ceglanoego, oraz określenie wpływu skurczu związanego ze schnięciem zaprawy na jej adhezję do podłoża. Próby potwierdziły wcześniejsze ustalenia, że zagrożenie zapraw uszkodzeniami fizycznymi można minimalizować przez odpowiednią zawartość kruszywa w mieszaninie i ograniczony czas hydratacji. Wyniki prób praktycznych znajdują się w podręczniku optymalnego stosowania cementów romańskich, najważniejszej publikacji projektu służącego działaniom rynkowym.

Instytut uczestniczył również w opracowaniu bazy danych porównującej właściwości zapraw projektu ROCARE z zaprawami opartymi na spoiwach stosowanych przez konserwatorów w konserwacji budowli. Instytut dostarczył danych dotyczących struktury porowatości dla szerokiego zakresu składów i czasów dojrzewania zapraw.

Instytut jest odpowiedzialny za realizację Pakietu Zadań 3 "Upowszechnianie i marketing". W okresie sprawozdawczym zorganizował w Krakowie zebranie podsumowujące połowę jego realizacji, został przyjęty i zaaprobowany przez Komisję Europejską odpowiedni raport. Działania edukacyjne i informacyjne w ramach tego pakietu objęły warsztaty i broszury o projektach konserwatorskich stosujących technologię cementu romańskiego.



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

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

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Konsorcjum F3 zakłada, że przemysł chemiczny w EU powinienem zwiększyć swoją konkurencyjność poprzez stosowanie ciągłych instalacji modułowych operujących w średnich i małych skalach produkcyjnych (Instalacje F3). Koncepcja F3 zakłada osiągnięcie produkcji bardziej ekonomicznej, ekologicznej i wydajnej niż stosowane obecnie metody produkcji, np.: ciągłej na skalę światową czy produkcji jednostkowej typu 'batch' na mniejszą skalę. Tabela poniżej przedstawia obecną sytuację produkcyjną oraz zaproponowany nowoczesny koncept F3. Zastosowanie koncepcji F3 powinno wzmocnić europejski przemysł chemiczny względem ich światowych odpowiedników.

Obecne problemy	Nowoczesna produkcja
Urządzenia do produkcji ciągłej na światową skalę: Efektywna ale nieelastyczna	Zwiększenie elastyczności w produkcji na światową skalę
Uniwersalne, zmiennie produktowe instalacje do produkcji jednostkowej: Elastyczne lecz nieefektywne	Zwiększenie efektywności uniwersalnej zmiennie produktowej instalacji jednostkowej
Obie koncepcje wymagają znaczących nakładów inwestycyjnych? Wysokie ryzyko biznesowe	Zmniejszenie ryzyka biznesowego

Jednym z dwóch kluczowych celów projektu F3 jest opracowanie nowej technologii produkcji przemysłowej opartej na modułowej, uniwersalnej oraz elastycznej instalacji, na instalacji mogącej służyć nie tylko jednemu dedykowanemu procesowi, lecz instalacji adoptowalnej do wielu procesów produkcyjnych. W osiągnięciu tego celu zaproponowano użycie filozofii "włącz i używaj" «plug-and-play». Drugi cel to tzw. intensyfikacja procesu, która odbędzie się na następujących poziomach:

- Wykorzystanie istniejącej wiedzy w celu polepszenia procesu produkcyjnego
- Zaprojektowanie/zastosowanie nowych urządzeń (np. nowe reaktory, katalizatory)

Naszym zadaniem w projekcie jest walidacja technologii F3. Badania przeprowadzone w naszym instytucie dotyczą oceny właściwości adsorpcyjnych poli(kwasu akrylowego) PAA otrzymanego z monomeru kwasu akrylowego pochodzącego z bio-źródła, w nowym procesie produkcyjnym. W roku 2011 wykonaliśmy badania adsorpcji polimeru PAA za pomocą mikrowagi kwarcowej QCM (adsorpcja na powierzchni złota) oraz badania adsorpcji nowego PAA na cząstkach koloidalnych (np. CaCO₃). Wykazaliśmy, że polimer otrzymany z monomeru wytwarzanego w nowym procesie produkcyjnym (bio-źródło, F3 koncept) ma zbliżone właściwości adsorpcyjne do polimeru otrzymywanego starą metodą. Wykazaliśmy także, że zanieczyszczenia powstające podczas nowego procesu nie wpływają na końcowe właściwości polimeru.

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. dr hab. Józef Korecki)

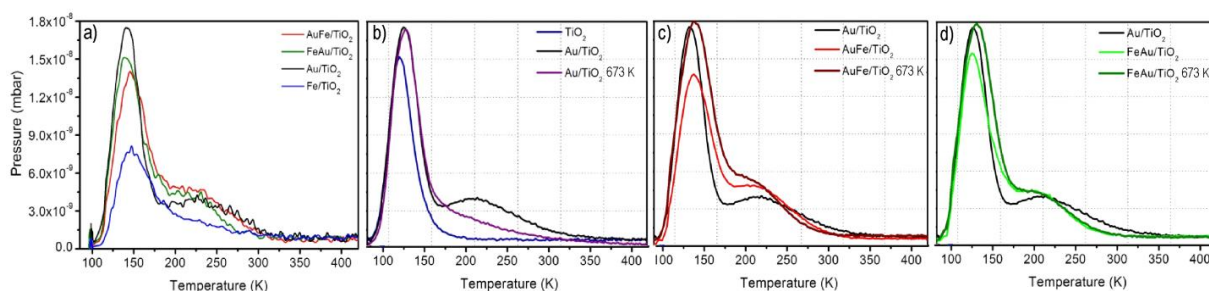
Funkcjonalizacja warstwy granicznej bimetalicznych nanocząstek dla syntezy wysoko aktywnych i selektywnych katalizatorów; zrozumienie efektów synergicznych i promotora
(prof. dr hab. Józef Korecki, dr Nika Spiridis, prof. dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, dr hab. Ryszard Grabowski prof IKiFP PANi,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

Techniką temperaturowo-programowanej desorpcji (TPD) przeprowadzono badania adsorpcji CO na bimetalicznym modelowym układzie katalitycznym. Bimetaliczne nanocząstki Au-Fe wytwarzano poprzez naporowywanie poszczególnych metali w warunkach ultra wysokiej próżni (UHV) na powierzchnię nośnika, którym był monokryształ rutylu $\text{TiO}_2(110)$ i charakteryzowano przy pomocy technik STM i XPS w szerokim zakresie pokryć. Badano wpływ kolejności nanoszenia metali (Au, Fe lub Fe, Au) na adsorpcję tlenku węgla (CO) w funkcji wygrzewania układu.

Pomiary TPD wykonano dla układów otrzymanych przez nanoszenie 0.1 monowarstwy (ML) zarówno złota jak i żelaza. CO adsorbowano w temperaturze 95 K, przy ciśnieniu parcjale 1.3×10^{-8} mbar. Ekspozycja wynosiła zawsze 1 Langmuir. Krzywe desorpcji zbierano przy użyciu kwadrupolowego spektrometru masowego (SRS 200, Stanford Research) specjalnie przystosowanego do pomiarów TPD w warunkach UHV. Prędkość grzania próbki wynosiła 1.5 K s^{-1} .

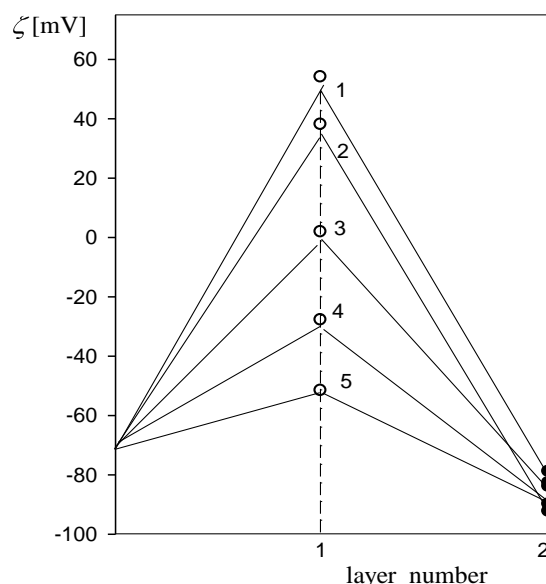
Rys. b przedstawia profil desorpcji CO (masa 28) z czystej powierzchni $\text{TiO}_2(110)$ (krzywa niebieska). Maksimum pików przypada w temperaturze 150 K. Dla próbki, na którą w temperaturze pokojowej osadzono 0.1 ML Au na profilu desorpcji (rys. a, b, c, d - krzywa czarna) widoczny jest dodatkowy, szeroki pik rozciągający się do pokojowej temperatury z maksimum w temperaturze około 230 K. Odpowiada on desorpcji CO z nanocząstek Au. W przeciwieństwie do złota, 0.1 ML Fe na powierzchni $\text{TiO}_2(110)$ blokuje centra adsorpcji CO, co objawia się zmniejszoną intensywnością pików przy 150 K. Pokrycie żelaza złotem powoduje powstanie silnie rozproszonego układu klastrow na powierzchni $\text{TiO}_2(110)$ i malejącą adsorpcję CO na podłożu w wyniku blokady miejsc adsorpcyjnych (rys. c, krzywa jasnoczerwona). Jednocześnie widoczny jest wzrost desorpcji CO w wyższych temperaturach z maksimum przy 235 K. Krzywe desorpcji dla Au/ TiO_2 i AuFe/ TiO_2 są do siebie podobne w zakresie wyższych temperatur.

Wygrzewanie w 673 K przez ½ godziny powoduje w przypadku układu Au/ TiO_2 znaczny spadek adsorpcji CO, co przejawia się zanikiem pików desorpcji przy 235 K. Dodanie Fe do układu, niezależnie od kolejności nanoszenia metali, skutkuje utrzymaniem się wysokotemperaturowego pików desorpcji związanego z adsorpcją CO na małych klastrowach złota. Oznacza to, że dodanie żelaza zapobiega dyfuzji złota po powierzchni $\text{TiO}_2(110)$ w podwyższonych temperaturach i stabilizuje małe, katalitycznie aktywne klastery złota. Przeprowadzone pomiary wykazały, że dodatek Fe może mieć pozytywny wpływ na właściwości katalityczne katalizatorów rzeczywistych.



Projekt badawczy EU COST Action D43 [2006-2011]
 (reprezentant Polski: prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk)
 (wykonawcy: prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk,
 mgr Maria Dąbkowska)

Prace badawcze prowadzone w ramach niniejszego projektu badawczego miały min. na celu określenie mechanizmów tworzenia multiwarstw cząstek koloidalnych, polielektrolitów i białek na powierzchniach międzyfazowych. Ma to istotne znaczenie poznawcze i aplikacyjne, np. przy wytwarzaniu systemów selektywnego dostarczania leków opartych na preparatach w postaci mikrokapsulek. Jedną z najbardziej bezpośrednich metod charakterystyki pokryć multiwarstwowych jest metoda potencjału przepływu, umożliwiająca pomiary w warunkach *in situ*. Poprawna interpretacja wyników uzyskanych dla polielektrolitów wymaga jednak pomiarów kalibracyjnych dla układów modelowych. Tak więc, istotnym aspektem było przeprowadzenie pomiarów doświadczalnych dla modelowych suspensji koloidalnych: lateksów polistyrenowych o kontrolowanym ładunku powierzchniowym i rozmiarach cząstek. Na Rysunku 1, przedstawione są wyniki uzyskane przy pomocy metody potencjału przepływu dla biwarstw tworzonych na powierzchni miki przez cząstki lateksu A500 o dodatnim znaku ładunku powierzchniowego oraz cząstki lateksu L800 o ujemnym znaku ładunku powierzchniowego. Istotnym wnioskiem wynikającym z tych pomiarów jest to, że potencjał zeta biwarstwy staje się praktycznie niezależny od stopnia pokrycia monowarstwy, nawet tak nieznacznego, jak 5%. Warto podkreślić, że wyniki pomiarów przedstawionych na Rysunku 1 mają podstawowe znaczenie dla interpretacji badań prowadzonych dla układów białkowych, w szczególności dla określenia oddziaływań w układzie antycyalo/antygen.



Rys. 1. Tworzenie biwarstw lateksów A500/L800 na powierzchni miki przedstawione w formie zależności potencjału zeta ζ od numeru warstwy (pH = 5.5, $I=10^{-2}$ M, $T=293$ K).

1. $\Theta_s = 0.50$, $\Theta_p = 0.5$ (monowarstwa kompletna), 2. $\Theta_s = 0.20$, $\Theta_p = 0.5$ (monowarstwa niekompletna),
3. $\Theta_s = 0.10$, $\Theta_p = 0.45$ (monowarstwa niekompletna), 4. $\Theta_s = 0.05$, $\Theta_p = 0.25$ (monowarstwa niekompletna),
5. $\Theta_s = 0.02$, $\Theta_p = 0.15$ (monowarstwa niekompletna)

Punkty oznaczają wyniki doświadczalne uzyskane przy pomocy metody potencjału przepływu.

[M. Zaucha, Z. Adamczyk, J. Barbasz; J. Colloid Interface Sci., 360, 2011, 195]

3. Wood Science for Conservation of Cultural Heritage



Projekt badawczy EU COST Action IE0601 [2006-2011]
(*representant Polski: prof. dr hab. Roman Kozłowski*)

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

(*prof. dr hab. Roman Kozłowski, dr Leszek Krzemień, dr Marcin Strojecki, mgr Bartosz Rachwał, mgr Marek Giebułtowski*)

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

Głównym zadaniem instytutu w projekcie było opracowanie analizy metodą elementów skończonych, wspartej pomiarami fizycznych właściwości materiałów, do modelowania transportu pary wodnej, odkształceń i naprężeń w obrazach na desce oraz polichromowanych rzeźbach, w odpowiedzi na zmieniające się warunki klimatyczne. To narzędzie badawcze umożliwiło naukową ocenę wpływu wahań parametrów mikroklimatycznych na proces niszczenia obiektów zabytkowych.

W okresie sprawozdawczym, opracowana metoda posłużyła do wyznaczenia dopuszczalnej amplitudy cyklicznych sinusoidalnych fluktuacji wilgotności względnej (RH) dla swobodnie odpowiadającej wymiarowo deski drewnianej pokrytej warstwą zaprawy klejowej, tj. amplitudy, którą warstwa zaprawy wytrzyma bez fizycznego uszkodzenia w przyjętym czasie ekspozycji. Parametr ten wyznaczono w funkcji czasu trwania cyklu, grubości deski i konfiguracji dyfuzji. Odpowiedź wymiarowa obrazów na cienkich podłożach jest ograniczona nałożoną warstwą zaprawy, przy czym więzy zależą od modułu elastyczności zaprawy i jej grubości. Obrazy na desce nie odpowiadają znacząco na fluktuacje dzienne lub krótsze. Deski odpowiadają coraz bardziej, kiedy czas trwania fluktuacji rośnie, tak że wywołuje ona pełną odpowiedź deski na każdy cykl. Najgorszym przypadkiem jest deska o grubości 10 mm z obydwoma płaszczyznami otwartymi na dyfuzję pary wodnej, w której otoczeniu zachodzą fluktuacje o okresie 14 dni. Odpowiadająca temu przypadkowi najniższa dopuszczalna amplituda fluktuacji wynosi $\pm 14\%$ RH. Tak więc uwzględnienie złożonego obiektu oraz zależności odkształcenia wywołującego uszkodzenie zaprawy od liczby cykli odkształcających, skutkuje zwiększeniem dopuszczalnej amplitudy dla najgroźniejszych cykli RH z zaledwie $\pm 6\%$ RH wyznaczonej dla uproszczonego kryterium uszkodzenia zaprawy w jednym cyklu i bez uwzględnienia ograniczenia, jakie nakłada warstwa zaprawy na swobodny ruch podłoża drewnianego.

Zaawansowano również modelowanie numeryczne transportu pary wodnej i odkształceń układu drewna pokrytego warstwą zaprawy malarskiej w warunkach wysokiej średniej rocznej wilgotności względnej i niskich temperatur zimowych. Rozpatrzenie takich warunków jest ważne dla ochrony wrażliwych obiektów zabytkowych znajdujących się w nieogrzewanych kościołach i rezydencjach w klimacie północnym. Stwierdzono, że dopuszczalna amplituda fluktuacji RH znacznie rośnie, kiedy obniża się temperatura, w której przechowuje się obrazy na desce. Efekt ten jest wynikiem zmniejszenia się współczynnika dyfuzji pary wodnej w drewnie i związanego z tym wzrostu czasu odpowiedzi deski.

PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE

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



PO IG 1.1.2. [2008-2012] MPD

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Projekt "Krakow Interdisciplinary PhD-Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures" jest realizowany w ramach Międzynarodowych Projektów Doktoranckich (MPD) koordynowanych przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej i finansowanych w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka, Priorytet 1. Badania i rozwój nowoczesnych technologii, Działanie 1.2 Wzmocnienie potencjału kadrowego nauki. Projekt jest koordynowany przez dr hab. Bartłomieja Szafrana z Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, który jest partnerem w Projekcie. W Projekcie uczestniczą również jednostki zagraniczne: Universiteit Antwerpen (Belgia), University of Leeds (Wielka Brytania), National Research Centre INFM-CNR (Włochy), University of Stockholm (Szwecja), Max Plank Institute für Molekulare Pflanzenphysiologie (Niemcy), Max Plank Instytut für Kolloid und Grenzflächenforschung (Niemcy), Basque Country University (Hiszpania), SINTEF Material Chemistry (Norwegia), VŠB-Technical University of Ostrava (Czechy), Institute of Physical Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences (Bułgaria).

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

1. mgr Anna Wójcik (promotor: dr hab Tomasz Borowski prof. IKiFP PAN) "Computer Modeling of Biological Nanostructures"; Doktorantka przebywa na stażu w Sztokholmie od maja 2011.
2. mgr inż. Małgorzata Adameczak (promotor: prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński) "Surfactants, Polyelectrolytes and Nanoparticles as Building Blocks for Surface Nanostructures"; Doktorantka przebywa w norweskim ośrodku SINTEF od listopada 2010.
3. mgr inż. Dominik Kosior (promotor: prof. dr hab. Kazimierz Małyś) "Nanostructures and Stability of Thin Liquid Layers"; Doktorant odbył w roku 2011 staż półroczny w Sofii.
4. mgr inż. Katarzyna Luberd-Durdaś (promotor: prof. dr hab. Wiesław Łasocha) "Hybrid Organic-Inorganic Layered Materials - Precursors of Semiconducting Nanostructures"; W roku 2011 doktorantka odbyła 6-miesięczny staż w ośrodku w Ostrawie.
5. mgr inż. Ewa Młyńczak (promotor: prof. dr hab. Józef Korecki) "Surface and Interface Properties of Metal-Oxide Magnetic Nanostructures"; Doktorantka odbyła w roku 2011 6-miesięczny pobyt na stażu u partnera włoskiego, gdzie głównym przedmiotem jej badań były dwuwarstwy zawierające NiO.

Prace doktorskie są realizowane zgodnie z harmonogramem

2. ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości

PO KL 4.1.1. [2009-2015] ISD

(kierownik projektu:

dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP PAN)

Projekt realizowany w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki, koordynowany jest przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH we współpracy z IKiFP PAN i Instytutem Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie. Celem studiów doktoranckich jest wykształcenie specjalistów ze stopniem doktora.

Zadania naukowe realizowane w ramach ISD obejmują fizyczne, chemiczne i technologiczne aspekty wiedzy o materiałach oraz nowoczesnej energetyki. Projekt realizowany jest od 2009 roku. W chwili obecnej w jednostkach partnerskich studiuje 60 doktorantów (1 rok - 14 osób, 2 rok - 24 osoby, 3 rok - 22 osoby).

W Instytucie realizowanych jest 17 prac doktorskich:

I rok studiów

1. mgr Katarzyna Kubiak (promotor: prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk) "Synteza nowych materiałów warstwowych na bazie nanocząstek srebra, aktywnych w procesach selektywnego wiązania białek"
2. mgr Łukasz Kuterasiński (promotor: dr hab. Mirosław Derewiński prof. IKiFP PAN) "Hierarchiczne materiały porowate jako podstawa nowoczesnych procesów przemysłu rafineryjnego"

II rok studiów

3. mgr Piotr Batys (promotor: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN) „Wieloskalowe modelowanie nieodwracalnej adsorpcji nanocząstek na powierzchni międzyfazowej ciecz/ciało stałe”
4. mgr Anna Szymańska (promotor: prof. dr hab. Wiesław Łasocha) „Nowe materiały perokso- i polimetalanowe dla potrzeb katalizy, medycyny i nowych technologii”
5. mgr Anna Dziejicka (promotor: prof. dr hab. Bogdan Sulikowski) „Właściwości fizykochemiczne multiporowatych sit molekularnych”
6. mgr Marta Grzesiak (promotor: prof. dr hab. Wiesław Łasocha) „Metaloorganiczne struktury MOF - materiały dla katalizy, inżynierii krystalicznej i "zasobniki gazów”
7. mgr Żaneta Kalemba (promotor: dr hab. Alicja Drelinkiewicz prof. IKiFP PAN) „Badania na doborze katalizatorów dla reakcji eteryfikacji gliceryny”
8. mgr Anna Miłaczewska (promotor: dr hab. Tomasz Borowski prof. IKiFP PAN) „Modelowanie molekularne struktury i aktywności katalitycznej materiałów biologicznych”
9. mgr Dorota Szepietowska (promotor: prof. dr hab. Bogdan Sulikowski) „Właściwości fizykochemiczne katalizatorów hybrydowych zawierających sole wybranych heteropolikwasów”
10. mgr Maciej Tatko (promotor: dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN) „Nowe materiały na osnowie tlenków ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych stałotlenkowych ogniach paliwowych”
11. mgr Piotr Niemiec (promotor: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP PAN) "Teoretyczny opis właściwości fizykochemicznych heteropolikwasów"

III rok studiów

12. mgr Małgorzata Nosek (promotor: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN) „Analiza porowatości wielowarstwowych materiałów koloidalnych o kontrolowanej architekturze”
13. mgr Anna Pajor (promotor: prof. dr hab. Piotr Warszyński) „Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami"

14. mgr Małgorzata Krzak (promotor: dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN) „Wysokosprawne pokrycia antykorozyjne z materiałów kompozytowych na osnowie polimerów organicznych”
15. mgr Magdalena Oćwieja (promotor: prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk) „Nowe materiały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności zawierające nanocząstki srebra - zastosowanie biomedyczne”
16. mgr Justyna Dziejic (promotor: prof. dr hab. Piotr Warszyński) „Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami”
17. mgr Katarzyna Onik (promotor: dr hab. Mirosław Derewiński prof. IKiFP PAN) „Nowe materiały hierarchiczne oparte na nanoklasterach zeolitów jako podstawa nowoczesnych układów katalitycznych”

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



PO IG .2. 2. [2009-2011] SPINLAB

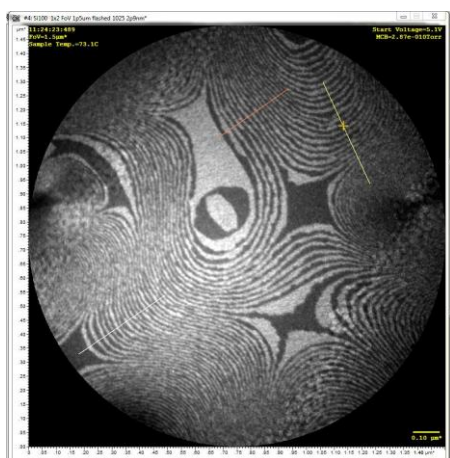
(kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Korecki)

Uruchomienie i testowanie mikroskopów LEEM oraz PEEM w warunkach laboratoryjnych.

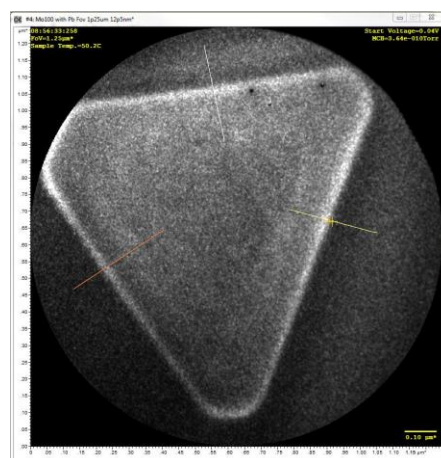
W ramach projektu SPINLAB zakupiono dwa mikroskopy elektronowe firmy ELMITEC do obrazowania powierzchni:

- mikroskop LEEM III obrazujący na elektronach niskoenergetycznych z możliwością obrazowania na fotoelektronach przeznaczony do pracy w Laboratorium Powierzchni i Nanostruktur
- fotoemisyjny mikroskop z analizatorem energii SPE-PEEM III przeznaczony do pracy przy krakowskim synchrotronie "SOLARIS" (~2014)

Mikroskopy zostały uruchomione i skonfigurowane w warunkach laboratoryjnych. Zweryfikowano ich parametry oraz przeprowadzono testy w zakresie pomiarów w dostępnych trybach pracy: LEEM w jasnym polu widzenia (bright field LEEM), LEEM w ciemnym polu widzenia (dark field LEEM), dyfrakcja elektronów niskoenergetycznych (LEED), dyfrakcja z mikroobszarów μ -LEED, obrazowanie na fotoelektronach wzbudzanych promieniowaniem lampy rtęciowej (PEEM), zwierciadlana mikroskopia elektronów (MEM), obrazowanie na elektronach emitowanych termicznie (TEM). Najlepsza zdolność rozdzielcza (kryterium 84%-16%) uzyskana w testach wynosi 3 nm w trybie LEEM dla powierzchni Si(100) (Rysunek 1) oraz 10 nm w trybie PEEM dla obrazów nanocząstek ołowiu na powierzchni Mo(100) (Rysunek 2).



Rys. 1. Obrazy w ciemnym polu uzyskane dla połowkowych refleksów zrekonstruowanej powierzchni Si(100) przy pomocy mikroskopu LEEM III. Pole widzenia: 1.5 μ m, rozdzielczość przestrzenna mierzona w 3 różnych miejscach: 2.9 nm, 3.7 nm i 3.8 nm.



Rys. 2. Obraz PEEM dla na powierzchni Mo(100), uzyskany przy pomocy spektroskopowego mikroskopu firmy Elmitec. Pole widzenia: 1.25 μ m, rozdzielczość przestrzenna mierzona w 3 różnych miejscach: 14.8 nm, 13.9 nm i 12. nm.

Mikroskop LEEM został wyposażony w komorę preparacyjną wraz z urządzeniami niezbędnymi do przygotowywania próbek. Obecnie trwa przystosowywanie mikroskopu PEEM do pracy w warunkach promieniowania synchrotronowego oraz doposażanie go w elementy niezbędne do preparatyki *in situ*.



BIOTRANSFORMACJE

4. BIOTRANSFORMACJE użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym

Zadanie 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych

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

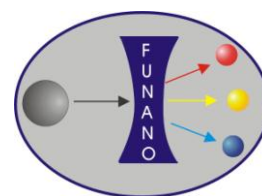
W ramach realizacji zadania 6 projektu Biotransformacje przeprowadzono badania nad dwoma systemami enzymatycznymi katalizującymi syntezę chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych: dehydrogenazą etylobenzenową (EBDH) i dehydrogenazą fenyloetanową (PEDH).

W pierwszym kwartale przeprowadzono badania czynników inaktywujących reakcję katalizowaną przez PEDH oraz EBDH. Przebadano wpływ temperatury, pH, dodatków solwentów organicznych oraz znanych czynników zatrzymujących reakcję (takich jak kwasy organiczne i mineralne, czynniki chemiczne). Wykazano termiczną inaktywację obu enzymów w podwyższonej temperaturze (45-55°C) oraz brak elektrochemicznej inaktywacji EBDH w reaktorze elektrochemicznym. Temperaturowe testy kinetyczne dla kilku substratów PEDH pokazały, że możliwa jest ilościowa charakterystyka wpływu struktury substratu na jego reaktywność poprzez wyznaczenie energii aktywacji. Przeprowadzone badania wykazały, że podstawniki elektro-akceptorowe przyspieszają reakcję redukcji, co wyrażało się niższą wartością wyznaczonej energii aktywacji E^a . Określono także, że optymalne pH do procesu redukcji alkiloaromatycznych ketonów katalizowanego przez PEDH wynosi 5.5. Nie powiodło się natomiast określenie odpowiedniego czynnika zatrzymującego reakcję z uwagi na ograniczenia testu aktywności. Dlatego stopowanie reakcji prowadzono wysalając i odwirowując białko z mieszaniny reakcyjnej. Zbadano, że 5% (v/v) dodatek typowych rozpuszczalników organicznych nie dezaktywuje enzymu. Ponadto obserwowano wzrost aktywności w obecności kilkunastoprocentowego dodatku acetonitrylu i etanolu a dla metanolu maksimum aktywności rejestrowano dla 40% stężenia rozpuszczalnika. Opracowanie optymalnych warunków testu katalitycznego wykorzystano w badaniach aktywności kilkunastu nowych substratów. Dla wielu z nich udało się potwierdzić obecność tylko jednego enancjomeru alkoholowego w mieszaninie reakcyjnej z PEDH.

Zgodnie z zadaniami na drugi i trzeci kwartał przeprowadzono optymalizację warunków pracy oczyszczonego enzymu w reaktorze homogenicznym typu batch z recyklingiem kofaktora NADH. W tym celu określono optymalne stężenie izopropanolu w układzie reakcyjnym (60% v/v), wykluczając jednocześnie zmianę stereoselektywności enzymu w warunkach wysokiego stężenia izopropanolu. Przeprowadzono konwersję kilku substratów, potwierdzając, że reakcja przebiega z dużą wydajnością (większą niż 40%). Do badań kinetycznych z wykorzystaniem RP-HPLC jako techniki pomiarowej posłużono się opracowanym wcześniej sposobem zatrzymywania reakcji. Prowadzono stopniowy up-scaling, zwiększając stężenie substratu od 0.5 mM do 50 mM. W dalszych badaniach czysty enzym zastąpiono niezhomogenizowanymi komórkami *E. coli*, bakterii wykorzystywanej jako źródło PEDH. Ułatwiło to znacznie kontrolę reakcji, bo choć nadal korzystano z RP-HPLC, to by zakończyć reakcję wystarczyło odwirować bakterie. Odzyskany katalizator użyto do kolejnej reakcji, potwierdzając wysoką konwersję w obu próbach (95% po 31 h).

W ramach zadania na ostatni kwartał 2011 roku przygotowano kwantowo-mechaniczne deskryptory substratów PEDH i EBDH. Dla PEDH postulowany mechanizm reakcji zakłada występowanie alkoksy anionu w stanie przejściowym. Dlatego obliczono entalpie swobodne utworzenia alkoksy anionów a otrzymane ΔG odniesiono do acetofenonu. Obliczenia wskazują na występowanie zależności pomiędzy charakterem podstawników a ΔG . Podstawniki wyciągające elektrony obniżają ΔG , przyspieszając reakcję.

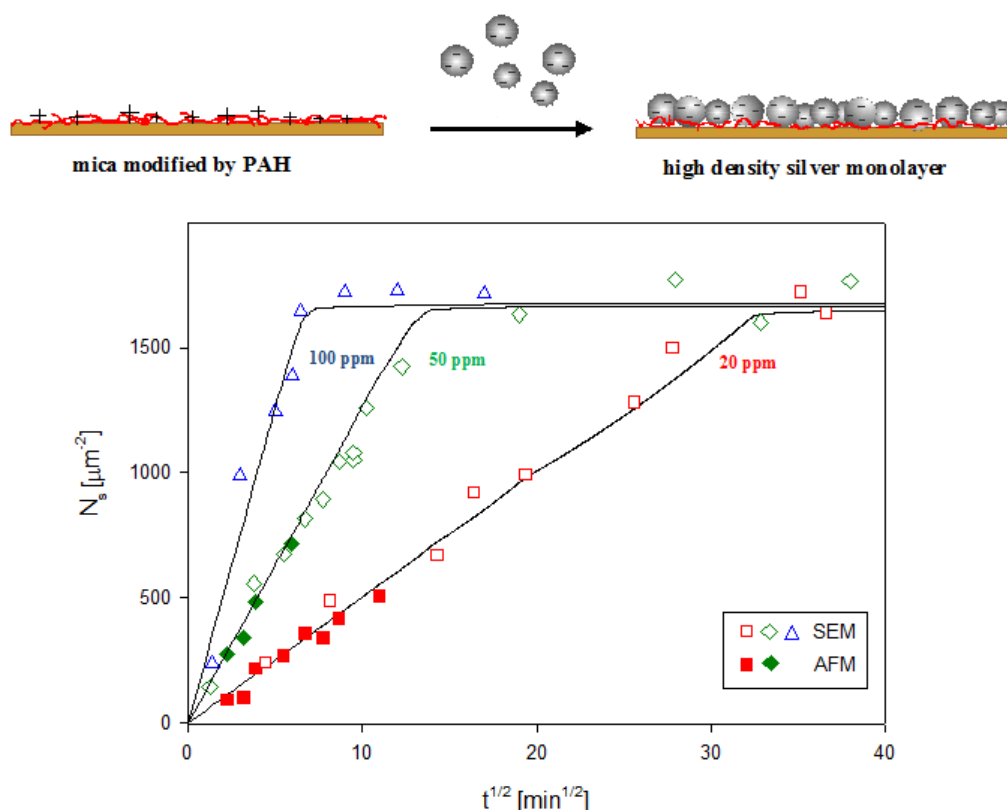
5. FUNANO: Funkcjonalne nano i mikrocząsteczki - synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach



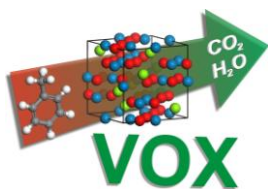
POIG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO

(kierownik projektu: prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk)

W ramach prowadzonych prac przeprowadzono syntezy monodispersyjnych nanocząstek srebra oparte na redukcji roztworów wodnych AgNO_3 przy pomocy NaBH_4 i cytrynianów, używanych jako czynniki stabilizujące. Zaletą tej metody jest wyeliminowanie polimerycznych stabilizatorów, wywierających negatywny wpływ na procesy osadzania cząstek na powierzchniach stałych, co było innym celem prowadzonych badań. Przeprowadzono obszerną charakterystykę fizykochemiczną tych suspensji i wykazano, że są stabilne w długim okresie czasu. Przeprowadzono pomiary kinetyki osadzania otrzymanych zoli srebra w warunkach transportu dyfuzyjnego na warstewkach polimerów kationowych naniesionych na powierzchni miki (Rysunek 1). Stężenie powierzchniowe wyznaczano w sposób bezpośredni przez zliczanie ilości cząstek na określonych obszarach przy użyciu mikroskopii AFM oraz mikroskopii scanningowej (SEM). Uzyskano w tych pomiarach stopień pokrycia cząstkami ponad 40%, co przekracza w znaczący sposób wartości uzyskane dotychczasowe w literaturze przedmiotu. Warto zaznaczyć, że zarówno kinetyka, jak również pokrycie maksymalne nanocząstek srebra zgadzały się dobrze z przewidywaniami teoretycznymi wynikającymi z modelu randomalnej, sekwencyjnej adsorpcji (RSA).



Rys. 1. Kinetyka osadzania nanocząstek srebra (średni rozmiar cząstek 16 nm) na powierzchni miki modyfikowanej adsorpcją polielektrolitu kationowego (PAH). Osadzanie w warunkach transportu dyfuzyjnego dla stężeń cząstek $c_b = 100, 50$ i 20 ppm, $t = 11$ h, $\text{pH} = 5,5$, $I = 10^{-2}$ M NaCl. Punkty oznaczają dane eksperymentalne, a linie ciągłe pokazują wyniki teoretyczne uzyskane przy zastosowaniu modelu RSA.



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

PO IG 2.1.1. [2009-2013] VOX

(kierownik projektu: prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska,
główny wykonawca: dr Tadeusz Machej)

Celem projektu jest opracowanie technologii otrzymywania skutecznych i niedrogich katalizatorów tlenkowych do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych z toksycznych gazów i par organicznych. Podstawą projektowania katalizatorów o innowacyjnej formule są syntetyczne minerały warstwowe, izomorficzne z hydrotalkitem, o ogólnym wzorze $[(M^{2+})_{1-x}(M^{3+})_x(OH)_2](A^{n-})_{x/n} \cdot m H_2O$, których specyficzna struktura pozwala na wymieszanie aktywnych katalitycznie pierwiastków na poziomie atomowym.

W roku 2011 kontynuowano optymalizację składu fazy aktywnej oraz warunków jej syntezy. Obok podstawowych składników warstwy brucytowej takich jak Mn, Cu i Al, do formuły katalizatora dodawano inne pierwiastki metaliczne, m.in. Co, Ce, Zr, La. W charakterze anionu kompensującego, obok pospolitych anionów takich jak węglan czy azotan, wprowadzono również anion nadmanganianowy. Podjęto badania nad alternatywnym sposobem syntezy prekursorów hydrotalkitowych, tzw. metodą odwróconej emulsji. Badania prowadzono na modelowym układzie magnezowo-glinowym. Otrzymane prekursory poddano rozkładowi termicznemu do materiałów tlenkowych. Zarówno hydrotalkity jak i tlenkowe produkty ich rozkładu termicznego zostały scharakteryzowane fizykochemicznie przy pomocy ICP OES, XRD, XPS, TPR, TG/DTG/DTA, BET, SEM, TEM. Przeprowadzono testy katalityczne otrzymanych materiałów w reakcji całkowitego spalania stosując jako związek modelowy toluen. Najbardziej aktywne katalitycznie fazy tlenkowe przeznaczono do badań nad przygotowaniem, w skali laboratoryjnej, katalizatorów osadzonych na nośnikach monolitycznych. Ważnym etapem tej fazy badań była optymalizacja warunków otrzymywania zawiesiny pokrywającej monolit i umożliwiającej dobre związanie fazy aktywnej z nośnikiem, tzw. washcoatu.

8. ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny

PO KL 4.1.1. [2010-2015] ISD MOLMED

(kierownik projektu: prof. dr hab. Małgorzata Witko)



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

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

W 2011 roku w ramach projektu zrealizowano następujące zadania:

- w I kwartale przeprowadzono postępowanie rekrutacyjne, w wyniku, którego przyjęto na studia 17 doktorantów,
- w II kwartale zorganizowano konkurs na tematy prac doktorskich. Do realizacji wyłoniono 23 tematy,
- w IV kwartale w ramach rekrutacji przyjęto kolejne 23 osoby.

Łącznie na ISD przyjęto 40 doktorantów, którzy rozpoczęli zajęcia dydaktyczne oraz podjęli badania naukowe w poszczególnych jednostkach. Doktoranci otrzymują miesięczne stypendia oraz dokonują zakupów materiałów niezbędnych do realizacji prac doktorskich. Nad przebiegiem realizacji projektu czuwa Rada Programowa składająca się z 8 członków - po dwóch reprezentantów z każdej jednostki partnerskiej.

INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE

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

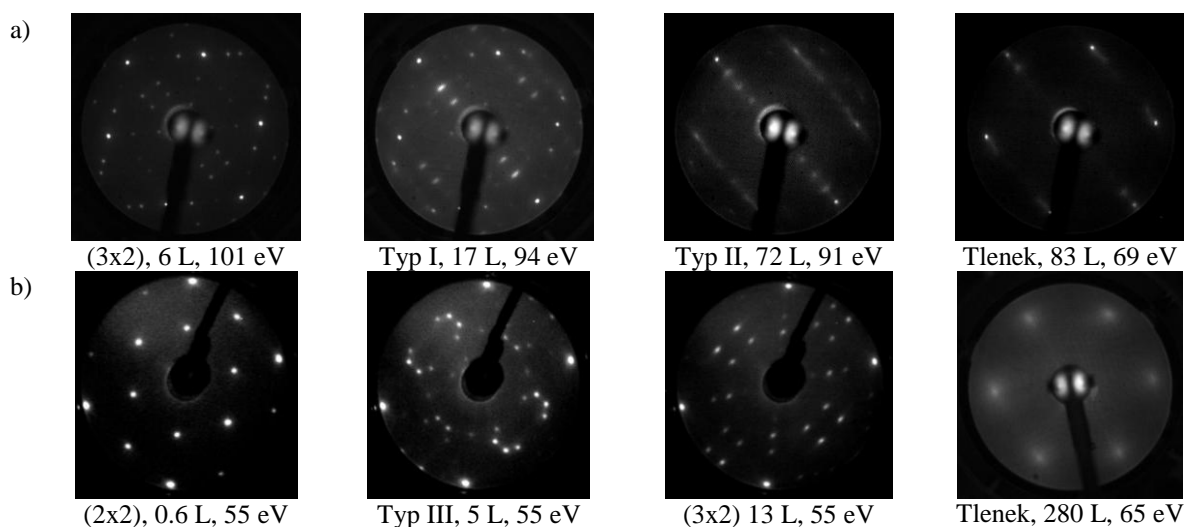
Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Austrii [2009-2011]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Korecki)

Wzrost i magnetyzm ultracienkich warstw żelaza na powierzchni W(110).

W nanostrukturach żelaza na powierzchni W(110) występuje szereg zaskakujących efektów wiążących ich własności strukturalne i magnetyczne. Zastosowanie do badania tych zjawisk jądrowego rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (NRS) pozwoliło na rozwikłanie skomplikowanej struktury magnetycznej ewoluującej podczas wzrostu warstw o grubości w zakresie od 1 do 5 monowarstw. W procesie wzrostu lokalne namagnesowanie, którego miarą jest magnetyczne pole nadsubtelne, zmienia swój stan od konfiguracji niekolinearnych momentów magnetycznych ze znaczącą składową prostopadłego namagnesowania do stanu jednorodnej magnetyzacji w kierunku [1-10]. Stany niekolinerane pojawiają się w obszarach mono-, dwu- i trzy warstwowych, które współistnieją w wyniku odchylenia wzrostu od idealnego warstwowego. Na szczególne podkreślenie zasługuje zaobserwowanie w temperaturze pokojowej prostopadłego namagnesowania w obszarach dwuwarstwowych otoczonych niemagnetyczną monowarstwą. Spostrzeżenie to wyjaśnia istotną lukę w badaniach metodami tradycyjnymi (magnetometria), które nie były w stanie zaobserwować trwałego namagnesowania ze względu na superparamagnetyczne fluktuacje momentów magnetycznych dwuwarstwowych wysepek. Metoda NRS o znacznie krótszym charakterystycznym czasie pomiaru i szybkiej akwizycji danych pozwoliła na wyjaśnienie struktury magnetycznej dwuwarstwowych wysp.

Adsorpcja tlenu na powierzchniach Fe(110)

Dotychczasowe badania adsorpcji tlenu w układzie Fe/W(110) wskazywały na znaczne zróżnicowanie struktur adsorpcyjnych w zależności od typu powierzchni żelaza, począwszy od pseudomorficznej monowarstwy (powierzchnia oznaczana będzie jako M), a skończywszy na powierzchni epitaksjalnych warstw Fe(110) o grubości rzędu 5 nm (oznaczanych jako B), dobrze symulujących powierzchnię litego żelaza. Dla dwóch skrajnych przypadków powierzchni M i B udało się sklasyfikować występujące struktury związane z adsorpcją tlenu molekularnego w temperaturze pokojowej w zakresie ekspozycji 0-200 L, poprzez wszystkie stany adsorpcyjne aż do początków tworzenia się fazy tlenkowej. Występujące struktury, których symetrie zinterpretowano w prostych modelach przedstawione są na Rysunku 1.



Rys. 1 Obrazy LEED dla adsorbentu tlenowego na powierzchni M (a) i B (b). Struktura typu III to zdefiniowana struktura znana z literatury jako tzw. „3x1”; I i II to nowe skomplikowane struktury powstające na skutek złożenia kilku struktur. Np. struktura I to złożenie (5x1), (3x1) i jeszcze jednej niezidentyfikowanej struktury.

3. Epitaksjalne nanostruktury, metaliczne i tlenkowe, badane przy pomocy jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Francji Program POLONIUM [2010-2011]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Korecki)

W litym FeO o strukturze wustytu tlen i żelazo tworzą idealne heksagonalne płaszczyzny (111). Podczas gdy atomy żelaza w płaszczyźnie są sprzężone ferromagnetycznie, sąsiadujące płaszczyzny (111) wykazują uporządkowanie antyferromagnetyczne. Ponadto płaszczyzny FeO(111) są polarne, co może w istotny sposób rzutować na właściwości epitaksjalnych warstw FeO o tej orientacji. Takie warstwy były do tej pory stabilizowane na powierzchni Pt(111) tylko do grubości 2-2.5 ML wykazując skomplikowaną strukturę wynikającą z niedopasowania stałych sieci adsorbentu i podłoża. Stosując specjalną metodę preparatyki jesteśmy w stanie stabilizować warstwy typu FeO(111) na Pt(111) do grubości kilkunastu nanometrów. Pomiar spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji pokazały silną zależność właściwości magnetycznych od grubości warstw, a w szczególności istnienie daleko-zasięgowego uporządkowania magnetycznego w temperaturze pokojowej dla warstw w przedziale grubości 3-7 ML. Dla wyjaśnienia źródeł tego zjawiska przeprowadziliśmy pomiary jądrowego rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (NRS). Pomiary wykonane były w układzie ultra wysokiej próżni (UHV) na wiązce ID 18 w ESRF Grenoble. Dostępna aparatura pozwala na wyznaczenie fononowych gęstości stanów *in situ* dla monowarstwowych próbek zawierających izotop ^{57}Fe .

Pomiary NRS wykonano dla warstw FeO o grubościach w zakresie 1-16 ML, które zostały uprzednio scharakteryzowane strukturalnie metodą dyfrakcji elektronów nisko energetycznych. W innej komorze układu UHV wykonane zostały pomiary widm czasowych i rozpraszania nieelastycznego, których analiza pokazała jednoznacznie, że przejściu strukturalnemu obserwowanemu pomiędzy czwartą a jedenastą monowarstwą towarzyszy anomalia właściwości magnetycznych. W całym zakresie grubości stwierdzono ponadto, że widma fononowe znacznie odbiegają od charakterystyki litego FeO. Ponieważ także widma czasowe oraz widma mössbauerowskie wskazują na odmienność cienkowarstwowej fazy FeO od wustytu, sugerujemy, że w warunkach wzrostu na Pt(111) stabilizuje się nietypowa faza FeO (np. o strukturze wurcytu lub typu NiAs, co pomaga skompensować polarność powierzchni (111)).

INNE ZADANIA

1. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ



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

W 2011 laboratorium CezaŚ wykonywało pomiary 4 akredytowanymi metodami badawczymi oraz metodami badawczymi opracowanymi we współpracy z pozostałymi zespołami i grupami badawczymi Instytutu. W marcu laboratorium zostało poddane "ocenie na miejscu" (audit w nadzorze). W trakcie oceny stwierdzono 3 niezgodności z wymaganiami. Ustalono przyczyny niezgodności oraz zaplanowano i wdrożono odpowiednie działania korygujące, które zostały pozytywnie ocenione przez Polskie Centrum Akredytacji (PCA). Z powodu braku zleceń od klientów oraz braku dostępu do obiektów, na terenie których możliwe byłyby pomiary, zawieszono czasowo akredytację na dwie procedury badawcze (do następnej oceny w nadzorze).

W omawianym okresie sprawozdawczym laboratorium CezaŚ zrealizowało:

1. 4 zlecenia zewnętrzne na łączną kwotę 13271,97 zł (10790,22 zł + VAT). Zlecenia obejmowały pomiary:
 - konwersji lotnych zanieczyszczeń organicznych w zakładach przemysłowych,
 - stężenia i składu chemicznego zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych,
 - charakterystyki procesu adsorpcji-desorpcji,
 - emisji gazowych zanieczyszczeń organicznych oraz sprawności rewersyjnych reaktorów katalitycznych.
2. 14 zleceń wewnętrznych z IKiFP PAN, obejmujących 17 różnych serii pomiarowych metodami:
 - chromatografii gazowej z detekcją masową,
 - spektroskopii w zakresie środkowej i bliskiej podczerwieni, z wykorzystaniem przystawek DRIFT i ATR oraz metodą transmisyjną,
 - chromatografii cieczowej z detekcją masową.

W omawianym okresie sprawozdawczym laboratorium CezaŚ przystąpiło do porównania międzylaboratoryjnego obejmującego pomiary stężenia LZO (całkowitego węgla organicznego wg normy PN-EN 13526:2005). Na skutek awarii przyrządu pomiarowego, w trakcie pomiarów, laboratorium zmuszone zostało do rezygnacji z uczestnictwa.

W celu pozyskania potencjalnego klienta na swoje usługi, laboratorium CezaŚ wysłało drogą elektroniczną 188 zapytań o przedstawienie oferty pomiarowej (zgodnie z ustawą o świadczeniu usług drogą elektroniczną, Dz U. z 2002, Nr 144 poz. 1204 z póź. zm.).

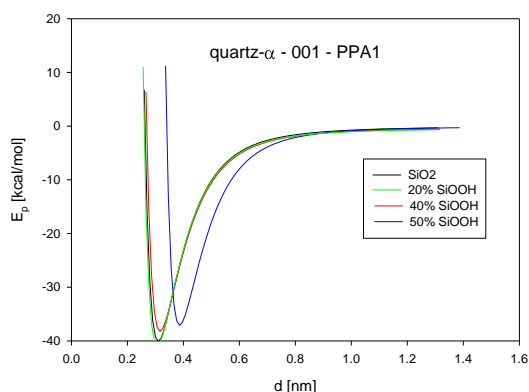
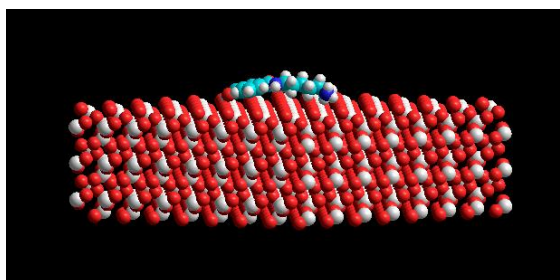
2. Wstępna ocena możliwości zastosowania symulacji molekularnych do obliczania adhezji polimerów

Opracowanie na zlecenie ABB
(prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński)

Celem opracowania była wstępna ocena możliwości zastosowania metod symulacji na poziomie molekularnym do obliczania siły adhezji polimerów do powierzchni różnych materiałów. Głównym obszarem zainteresowania było określenie możliwych do zastosowania metod i ocena ich przydatności do identyfikacji głównych czynników mających wpływ na adhezję dla układów: PPA-szkło (SiO_2), PPA-metal (Al), PPA-epoxy, epoxy-stal (Fe), epoxy-DLC(sp2), epoxy-DLC(sp3). Dla celów wstępnej analizy skoncentrowana się na pierwszych trzech pierwszych układach, dla których zaproponowano dobór modelowych cząsteczek i powierzchni reprezentujących dane materiały. Na przykładzie układów PPA- SiO_2 oraz PPA-Al przedstawiono koncepcję obliczeń na trzech poziomach uogólnienia problemu:

- poziom pojedynczych cząsteczek – obliczenia kwantowo-mechaniczne metoda DFT;
- poziom pojedyncza cząsteczka – powierzchnia - obliczenia metodą dynamiki molekularnej;
- poziom klaster cząsteczek – powierzchnia – obliczenia metodą dynamiki molekularnej.

Modelowanie na poziomie pojedyncza cząsteczka-powierzchnia wykonano metodą dynamiki molekularnej przy użyciu pola sił AMBER99 zaimplementowanego w pakiecie obliczeniowym Hyperchem 8. Na początku obliczeń generowana była modelowa cząsteczka reprezentująca PPA. Poszczególnym atomom cząsteczki były przypisywane ładunki ESP obliczone dla cząsteczki PPA metodą DFT. Geometrie cząsteczki minimalizowano. Następnie, generowana była powierzchnia modelowa w postaci kryształu o szerokości i długości co najmniej trzykrotnych rozmiarów liniowych cząsteczki PPA i grubości 1-2 komórek elementarnych. Atomom kryształu były przypisywane ładunki cząstkowe ESP wyznaczone na podstawie obliczeń klasterowych. W kolejnym etapie cząsteczkę PPA umieszczano w centralnym punkcie powierzchni i metodą dynamiki molekularnej minimalizowano energię potencjalną układu cząsteczka powierzchni, przy czym w trakcie minimalizacji pozycje atomów powierzchni nie były zmieniane, czyli cząsteczka PAA poruszała się w stałym polu sił powierzchni, dążąc do lokalizacji i konformacji o najniższej energii. Przykładową konformację cząsteczki PPA1 na powierzchni (001) α -kwarcu ilustruje Rysunek 1. Następnie analizowano zależność energii potencjalnej cząsteczki (jej środka masy) od odległości od powierzchni.



Rys. 1. Po lewej - przykładową konformacją cząsteczki PPA na powierzchni (001) α -kwarcu. Po prawej - zależność energii potencjalnej od odległości od powierzchni kwarcu α dla cząsteczki PPA dla różnych stopni hydroksylacji powierzchni.

3. Badania eksperymentalne nad wydzielaniem renu i jego stopów, a w szczególności stopów o składzie i właściwościach zbliżonych do tak zwanych nadstopów, na podłożu metalicznym na drodze elektrolizy

Praca badawcza zlecona przez KGHM ECOREN S.A.[2010-2011]

(dr hab. Paweł Nowak prof. IKiFP PAN, dr inż. Grzegorz Mordarski, dr Elżbieta Bielańska, dr Robert Socha, dr Dariusz Mucha, dr Roman Dula, inż. Daria Napruszewska, mgr Dawid Wodka, mgr inż. Maciej Tatko)

Przedmiotem badań było opracowanie technologii nakładania cienkich warstw renu oraz jego stopów, w szczególności stopów z niklem a także stopów potrójnych zawierających oprócz renu i niklu trzeci metal, na podłożu metalicznym, na drodze elektrolizy. Opracowanie technologii poprzedzone zostało badaniami nad elektrokryształizacją renu i jego stopów. W badaniach tych zastosowano szereg metod analitycznych oraz fizykochemicznych metod badania powierzchni mianowicie dyfrakcję rentgenowską (XRD) z użyciem przystawki niskokątowej, spektrometrię fotoelektronów (XPS) skaningową mikroskopie elektronową (SEM+EDS), fluorescencję rentgenowską (XRF) oraz metody elektrochemiczne, jak woltamperometria cykliczna (CV) i elektrochemiczna spektroskopia impedancyjna (EIS).

Wyniki badan nie mogą być ujawnione ze względu na wymogi ochrony własności intelektualnej.

4. Przeprowadzenie pomiarów grubości warstwy polimerowej techniką spektroskopowej elipsometrii obrazującej oraz analiza struktur termoczulych warstw polimerowych do hodowli komórek

Praca badawcza dla Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN w Zabrze
(*dr Lilianna Szyk-Warszyńska*)

Płytki krzemowe oraz szklane pokryte warstwami polimerów dostarczone przez Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN były badane metodą elipsometryczną w celu określenia grubości pokryw polimerowych w zależności od temperatury. W tym celu płytki krzemowe umieszczane były w celce elipsometrycznej służącej do pomiarów w środowisku wodnym i umożliwiającej pomiary w temperaturach w zakresie od 5-90°C. Celem tych badań było przebadanie wrażliwości polimerowych filmów termokurczliwych na zmiany temperatury. Grubości warstw polimerowych na płytkach krzemowych były mierzone metodą analizy wielokątowej (AOI) oraz analizy spektroskopowej. Analizę wielokątową wykonano przy długości fali $\lambda=510.3$ nm i zmiennym kącie padania od 50° do 80°, natomiast dla analizy spektralnej kąt padania wynosił 75°, a długość fali zmieniała się od 350 nm do 1100 nm. Oprócz tego były wykonane także pomiary przy jednej długości światła ($\lambda=510.3$ nm), AOI=75° i ROI=10 (Region of Incidence),

Analizę pomiarów wykonano za pomocą metodą Cauchy'ego (analiza wyników z pomiarów spektroskopowych, oraz pomiarów wielokątowych) oraz metody dopasowywania n i k (n - współczynnik załamania światła, k - współczynnik absorpcji światła).

Dostarczone płytki pokryte były warstwą kopolimeru etylenu i bezwodnika meteinowego (Et-MA), oraz warstwą Et-MA i termowrażliwą warstwą pochodnej poliglicydolu o różnych stężeniach nanoszonego polimeru. Również badane były płytki krzemowe i szklane hydroksylowane (DSP) i następnie funkcjonalizowane grupami aminowymi (DSA). Grupy aminowe po reakcji ze związkami bromowymi tworzyły warstwę oznaczoną jako DSB, która po reakcji polimeryzacji z monomerem metakrylowym tworzyła kolejną warstwę oznaczoną jako DSM. Grubości warstw polimerowych nałożonych na płytki szklane mierzone były tylko na sucho.

W wyniku przeprowadzonych pomiarów okazało się, że polimery będące pochodną poliglicydolu w wyniku zmian temperaturowych wykazują zmiany grubości warstwy, jednakże zmiana ta następuje w kierunku odwrotnym od spodziewanego, tzn. wraz ze wzrostem temperatury rośnie grubość warstwy. Tylko dla warstw bezpośrednio polimeryzowanych na powierzchniach płytek (DSM) wraz ze wzrostem temperatury następowało kurczenie się tychże warstw.

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2011

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

SPECJALNE WYDANIA CZASOPISM

1. "Jerzy Haber - a man who wanted to know and to understand. Sixty years of activity in the field of chemistry and catalysis", *Catalysis Today* [special issue (P. Nowak, M. Witko, Eds.)], 169 (2011) pp.257

PRACE PRZEGLĄDOWE I ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Zaucha "Colloid Particle and Protein Deposition - Electrokinetic Studies", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 168 (2011) 3-28
2. A. Bielański "Synteza związków nieorganicznych", in: "Misja nauk chemicznych" (B. Marciniec, Ed.), Nauka i Innowacje, Poznań 2011, p.11-27 [ISBN 978-83-934-106-0-6]
3. T. Borowski, P. E. M. Siegbahn "Density Functional Theory Studies on Non-Heme Iron Enzymes", in: "Iron-Containing Enzymes", (S. P. de Visser D. Kumar, Eds.), RCS Publishing, 2011, p.88-118 [ISBN 978-1-84973-181-2]
4. K. Małyś, J. Zawała, M. Krzan, M. Krasowska "Bubble Rising in Solutions, Local and Terminal Velocities, Shape Variations and Collisions with Free Surface", in: "Bubble and Drop Interfaces" (R. Miller, L. Liggieri, Eds.), Brill Publishers, Leiden Boston 2011, p.243-292
5. T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Zając, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Partyka-Jankowska, M. Rennhofer, A. I. Chumakov, S. Stankov, R. Rüffer, J. Korecki "Non-collinear Magnetisation Structure of an Epitaxial Fe/W(110) Film in the Vicinity of the Thickness-driven Spin Reorientation Transition" in: "ESRF Highlights 2011", (G. Admans, Ed.), ESRF, 2011, p. 16
6. J. Szaleniec, R. Tadeusiewicz, M. Szaleniec "Model choroby jako narzędzie lekarza XXI wieku - przydatność metod sztucznej inteligencji w medycynie na przykładzie sztucznych sieci neuronowych", in: "Elementy informatyki medycznej. Ścieżki kliniczne, wirtualny pacjent, telekonsultacje" (I. Roterman-Konieczna, Ed.), Wydawnictwo UJ, Kraków 2011, p.187-191 [ISBN 978-83-233-2958-9]

ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O CYRKULACJI MIĘDZYNARODOWEJ

1. Z. Adamczyk, J. Barbasz, M. Cieśla "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption at Solid Substrates" *Langmuir*, 27 (2011) 6868–6878
2. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Deposition of Colloid Particles on Protein Layers: Fibrinogen on Mica", *J. Colloid Interface Sci.*, 356 (2011) 454-464
3. W. Barzyk, J. Vuorinen "Application of the Vibrating Plate (VP) Technique to Measuring Electric Surface Potential, ΔV , of Solutions; the Flow Cell for Simultaneous Measurement of the ΔV and the Surface Pressure, IT ", *Colloids Surf. A*, 385 (2011) 1-10

4. U. Bazylińska, R. Skrzela, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, K. A. Wilk "Novel Approach to Long Sustained Multilayer Nanocapsules: Influence of Surfactant Head Groups and Polyelectrolyte Layer Number on the Release of Hydrophobic Compounds", *Soft Matter*, 7 (2011) 6113-6124
5. L. M. Berreau, T. Borowski, K. Grubel, C. Allpress, J. P. Wikstrom, M. E. Germain, E. V. Rybak-Akimova, D. L. Tierney "Mechanistic Studies of the O₂-dependent Aliphatic Carbon-carbon Bond Cleavage Reaction of a Nickel Enolate Complex", *Inorg. Chem.*, 50 (2011) 1047-1057
6. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka "Formaldehyde Activation by Cu(I) and Ag(I) sites in ZSM-5: ETS-NOCV Analysis of Charge Transfer Processes", *Catal. Today*, 169 (2011) 45–51
7. M. Dudek, M. Mosiałek, G. Mordarski, R. P. Socha, A. Rapacz-Kmita "Ionic Conductivity of the CeO₂-Gd₂O₃-SrO System", *Archiv. Metallurgy Mater.*, 56 (2011) 1249-1255
8. D. Duraczyńska, A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, E. M. Serwicka, L. Lityńska-Dobrzyńska "Hydrogenation of Acetophenone in the Presence of Ru Catalysts Supported on Amine Groups Functionalized Polymer", *Catal. Lett.*, 144 (2011) 83-94
9. A. Dudzik, K. Szymańska, A. B. Jarzębski, M. Tataruch, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "Biocatalytic Ketone Reduction - Production of Chiral Alcohols with (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", *Acta Biochimica Polonica, Suppl.*, 2 (2011) 58, 239
10. M. Elżbieciak-Wodka, M. Kolasińska-Sojka, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński "Transfer of Electroactive Agents of Different Molecular Size through the Polyelectrolyte Membranes", *J. Electroanal. Chem.*, 661 (2011) 162–170
11. U. Filek, E. Bielańska, R.P. Socha, A. Bielański "Reduced Copper Salt of Wells-Dawson Type Heteropolyacid as a Bifunctional Catalyst", *Catal. Today*, 169 (2011) 150-155
12. R. Grabowski, J. Słoczyński, M. Śliwa, D. Mucha, R. Socha, J. Skrzypek, M. Lachowska "Influence of Polymorphic ZrO₂ Phases and the Silver Electronic State on the Activity of Ag/ZrO₂ Catalysts in the Hydrogenation of CO₂ to Methanol", *ACS Catalysis*, 1 (2011) 266-278
13. A. J. Groszek, E. Lalik "Effect of Oxygen on the Production of Abnormally High Heats of Interaction with Hydrogen Chemisorbed on Gold", *Appl. Surf. Sci.*, 257 (2011) 3192-3195
14. M. Grzesiak, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Synthesis and XRPD Studies of New Barium Dicarboxylates", *Powder Diffr.*, 26 (2011) 53-65
15. J. Gurgul, K. Łątka, A. W. Pacyna, R. Pöttgen "Probing the SmRhSn Magnetic State by AC/DC Magnetic Measurements and ¹¹⁹Sn Mössbauer Spectroscopy", *Intermetallics*, 22 (2012) 154-159
16. J. Gurgul, M. Zimowska, D. Mucha, R. P. Socha, L. Matachowski "The Influence of Surface Composition of Ag₃PW₁₂O₄₀ and Ag₃PMo₁₂O₄₀ Salts on Their Catalytic Activity in Dehydration of Ethanol", *J. Mol. Catal. A*, 351 (2011) 1-10

17. A. Jamrozik, M. Mazurkiewicz, A. Małolepszy, L. Stobiński, K. Matlak, J. Korecki, K. J. Kurzydłowski, K. Burda "Mössbauer Spectroscopy Analysis of Iron Compounds in Carboxylated Multiwall Carbon Nanotubes and Their Ammonium salt", *Phys. Status Solidi A*, 208 (2011) 1783
18. J. Janas, S. Dźwigaj "Physico-chemical Properties of FeAlBEA and FeSiBEA Zeolites and Their Catalytic Activity in the SCR of NO with Ethanol or Methane", *Catal. Today*, 176 (2011) 272-276
19. J. Koperski, M. Strojceki, M. Krośnicki, T. Urbańczyk "Potentials of the $D^1O_u^+(6^1S_0)$ and $F^3I_u(6^3P_2)$ Electronic Rydberg States of Cd_2 from *Ab initio* Calculations and Laser-induced Fluorescence Excitation Spectra", *J. Phys. Chem. A*, 115 (2011) 6851-860
20. D. Kosior, J. Zawała, K. Małysa "When and How α -Terpineol and n-Octanol Can Inhibit the Bubble Attachment to Hydrophobic Surfaces", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 47 (2011) 169-182
21. R. Kosydar, A. Drelinkiewicz, E. Lalik, J. Gurgul "The Role of Alkali Modifiers (Li, Na, K, Cs) in Activity of 2%Pd/Al₂O₃ Catalysts for 2-Ethyl-9,10-anthraquinone hydrogenation", *Appl. Catal. A*, 402 (2011) 121-131
22. M. Krasowska, M. Ferrari, L. Liggieri, K. Małysa "Influence of n-Hexanol and n-Octanol on Wetting Properties and Air Entrapment at Superhydrophobic Surfaces", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13 (2011) 9452-9457
23. K. Krupa-Żuczek, K. Bialik-Wąsa, A. Sobczak-Kupiec, M. Piątkowska, M. Zimowska, B. Tyliszczak "Polymers Modified by Silver Nanoparticles as Dispersants for Hydroxyapatite in Aqueous Systems", *Digest J. Nanomater. Biostructures*, 6 (2011) 1725-1732
24. I. Kumakiri, S. Diplas, C. Simon, P. Nowak "Photocatalytic Membrane Contactors for Water Treatment", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 50 (2011) 6000-6008
25. E. Lalik "Kinetic Analysis of Reduction of MoO₃ to MoO₂", *Catal. Today*, 169 (2011) 85-92
26. E. Lalik "An Empirical Dependence of Frequency in the Oscillatory Sorption of H₂ and D₂ in Pd on the First Ionization Potential of Noble Gases", *J. Chem. Phys.*, 135 (2011) 064702
27. Ł. Lasyk, M. Łukomski, Ł. Bratasz "Simple Digital Speckle Pattern Interferometer (DSPI) for Investigation of Art Objects", *Optica Applicata*, 41 (2011) 687-700
28. K. Luberda-Durnaś, B. Gaweł, M. Łoś, W. Łasocha "Synthesis and Characterization of Inorganic-organic ZnS(aminopropane)_n Composite Materials" *Crystal Res. Technol.*, 46 (2011) 1283-1290
29. K. Luberda-Durnaś, M. Nieznalska, M. Mazurkiewicz, A. Małolepszy, G. Khachataryan, K. Khachataryan, P. Tomasik, O. Michalski, K. Matlak, J. Korecki, L. Stobiński, K. Burda "Studies of Fe-binding Sites within Multiwall Carbon Nanotubes Using Mössbauer Spectroscopy", *Phys. Status Solidi A*, 208 (2011) 1796

30. K. Łątka, J. Gurgul, A. W. Pacyna, R. Pöttgen "Electronic and Magnetic Properties of Ternary Stannides RERhSn (RE=Tb, Dy and Ho)", *Solid State Phenomena*, 170 (2011) 74-77
31. D. Majda, A. Korobov, U. Filek, B. Sulikowski, P. Midgley, D. A. Nicol, J. Klinowski "Low-temperature Thermal Decomposition of Crystalline Partly and Completely Deuterated Ammonium Perchlorate", *Chem. Phys. Lett.*, 504 (2011) 185-188
32. A. Martínez, E. Peris, M. Derewiński, A. Burkat-Dulak "Improvement of Catalyst Stability During Methane Dehydroaromatization (MDA) on Mo/HZSM-5 Comprising Intracrystalline Mesopores", *Catal. Today*, 169 (2011) 75-84
33. L. Matachowski, A. Drelinkiewicz, E. Lalik, D. Mucha, B. Gil, Z. Brożek-Mucha, Z. Olejniczak "The Influence of Reagent Used for the Precipitation of Cs₂HPW₁₂O₄₀ Salt on its Textural and Catalytic Properties", *Microporous Mesoporous Mater.*, 144 (2011) 46-56
34. A. Michna, Z. Adamczyk, M. Oćwieja, E. Bielańska "Kinetics of Silver Nanoparticle Deposition onto Poly(ethylene imine) Modified Mica Determined by AFM and SEM Measurements", *Colloids Surf. A*, 377 (2011) 261-268
35. J. Matusik, E. Wisła-Walsh, A. Gaweł, E. Bielańska, K. Bahranowski "Surface Area and Porosity of Nanotubes Obtained from Kaolin Minerals of Different Structural Order", *Clays Clay Minerals*, 59 (2011) 1160-135
36. M. Mosiałek, G. Mordarski, P. Nowak, W. Simka, G. Nawrat, M. Hanke, R. P. Socha, J. Michalska "Phosphate-permanganate Conversion Coatings on the AZ81 Magnesium Alloy: SEM, EIS and XPS Studies", *Surface Coatings Technol.*, 206 (2011) 51-62
37. D. Mucha, L. Matachowski, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha "Unique Cation Surroundings in the Structure of Ag₃PW₁₂O₄₀ Salt", *Solid State Sci.*, 13 (2011) 1276-1284
38. M. Nattich, Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Radziszewska "Detection of Fibrinogen Monolayers on Mica by the Colloid Enhancement", *Environ. Biotechnol.*, 7 (2011) 1-11
39. A. Niecikowska, J. Zawała, K. Małyś "Influence of Adsorption of n-Alkyltrimethylammonium Bromides (C₈, C₁₂, C₁₆) and Bubble Motion on Kinetics of the Bubble Attachment to Mica Surface", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 47 (2011) 237-248
40. P. Nowak, M. Nastawny, I. Kozyra, A. Węgrzynowicz "Controlled Adsorption at the Surface of Copper Sulfide Minerals - A Way to Abate the Problem of Environment Contamination by the Copper Sulfide Oxidation Products?", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 47 (2011) 131-138
41. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "High Density Silver Nanoparticle Monolayers Produced by Colloid Self-assembly on Polyelectrolyte Supporting layers", *J. Colloid Interface Sci.*, 364 (2011) 39-48
42. K. Ostrowska, K. Szymoniak, M. Szczurek, K. Jamroży, M. Rapała-Kozik "Efficient Regioselectiveheterocyclisation Leading to Fluorescent Fused Pyrazine Derivatives", *Tetrahedron*, 67 (2011) 5219-5227

43. H. Pálková, L. Jankovič, M. Zimowska, J. Madejová "Alterations of the Surface and Morphology of Tetraalkyl-ammonium Modified Montmorillonites upon Acid Treatment", *J. Colloid Interface Sci.*, 363 (2011) 213-222
44. T. Pańczyk, P. J. Camp, G. Pastorin, T. P. Warzocha "Computational Study of Some Aspects of Chemical Optimization of a Functional Magnetically Triggered Nanocontainer", *J. Phys. Chem. C*, 115 (2011) 19074-19083
45. T. Pańczyk, T. P. Warzocha, P. J. Camp "Enhancing the Control of a Magnetically Capped Molecular Nanocontainer: Monte Carlo Studies", *J. Phys. Chem. C*, 115 (2011) 7928-7938
46. W. Płaziński "Molecular Basis of Calcium Binding by Polyguluronate Chains. Revising the Egg-box Model", *J. Comp. Chem.*, 32 (2011) 2988-2995
47. W. Płaziński, A. Płazińska "Molecular Dynamics Study of the Interactions between Phenolic Compounds and Alginate/Alginic Acid Chains", *New J. Chem.*, 35 (2011) 1607-1614
48. W. Płaziński, W. Rudziński "Biosorption of Heavy Metal Ions: Ion-exchange versus Adsorption and the Heterogeneity of Binding Sites", *Adsorption Sci. Technol.*, 29 (2011) 479-486
49. M. Radoń, E. Broclawik "Mono- and Dinitrosyls on Copper(I) Site in a Zeolite Model: Effects of Static Correlation", *J. Phys. Chem. A*, 115 (2011) 11761-11774
50. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot "DFT and *Ab initio* Study of Iron-Oxo Porphyrins: May They Have a Low-Lying Iron(V)-Oxo Electromer?", *J. Chem. Theory Comput.*, 7 (2011) 898-908
51. A. Rafalska-Łasocha, K. Podulka, W. Łasocha "XRPD Investigations of "Prussian blue" Artists' Pigment", *Powder Diffr.*, 26 (2011) 39-47
52. W. Rudziński, A. Komosa "History and Current Research in the Field of Radiochemistry at Maria Curie-Skłodowska University", *Anal. Bioanal. Chem.*, 400 (2011) 1593-1604
53. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, E. M. Serwicka "Allylic Oxidation of Cyclohexene Catalyzed by Manganese Porphyrins: DFT Studies", *Catal. Today*, 169 (2011) 10-15
54. G. Sastre, F. Fajula, M. Derewiński, M. Stocker "Special Issue: Corma 60", *Microporous Mesoporous Mat.*, 146 (2011) 1-2
55. P. E. M. Siegbahn, T. Borowski "Comparison of QM-only and QM/MM Models for the Mechanism of Tyrosinase", *Faraday Discuss.*, 148 (2011) 109-117
56. J. Słoczyński, B. Grzybowska, A. Kozłowska, K. Samson, R. Grabowski, A. Kotarba, M. Hermanowska "Effect of Potassium on Physicochemical Properties of $\text{CrO}_x/\text{Al}_2\text{O}_3$ and $\text{CrO}_x/\text{TiO}_2$ Catalysts for Oxidative Dehydrogenation of Isobutane: the Role of Oxygen Chemisorption", *Catal. Today*, 169 (2011) 29-35
57. A. Sobczak-Kupiec, D. Malina, Z. Wzorek, M. Zimowska "Influence of Silver Nitrate Concentration on the Properties of Silver Nanoparticles", *Micro Nano Lett.*, 6 (2011) 656-660

58. A. Sobczak-Kupiec, D. Malina, M. Zimowska, Z. Wzorek "Characterization of Gold Nanoparticles for Various Medical Application", *Digest J. Nanomater. Biostructures*, 6 (2011) 803-808
59. A. Sobczak-Kupiec, Z. Wzorek, A. Michalik-Zym, P. Radomski "Wpływ procesu suszenia hydrdoksypatyty na jego właściwości powierzchniowe", *Przem. Chem.*, 90 (2011), 1382-1386
60. N. Spiridis, R. P. Socha, B. Handke, J. Haber, M. Szczepanik, J. Korecki "Cluster-support Interaction in Au-Fe₃O₄ System", *Catal.Today*, 169 (2011) 24-28
61. R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, M. Witko "Electronic Structure of MoO₂. DFT Periodic and Cluster Model Studies", *Applied Catal. A*, 391 (2011) 137-143
62. T. Urbańczyk, M. Strojcecki, J. Koperski "Structure of Vibrational Bands of the E³Σ⁺(6³S₁) ← A³Π₀⁺(5³P₁), B³Σ₁⁺(5³P₁) Transitions in CdAr and CdKr Studied by Optical-optical Double Resonance Method", *Chem. Phys. Lett.*, 503 (2011) 18-24
63. M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Fibrinogen Adsorption on Mica Studied by AFM and in Situ Streaming Potential Measurements", *Langmuir*, 27 (2011) 686–696
64. K. Wojciechowski, A. Bitner, P. Warszyński, M. Żubrowska "The Hofmeister Effect in Zeta Potentials of CTAB-stabilised Toluene-in-water Emulsions", *Colloids Surf. A*, 376 (2011) 122-126
65. A. Wójcik, T. Borowski, E. Broclawik "The Mechanism of the Reaction of Intradiol Dioxygenase with Hydroperoxy Probe. A DFT Study", *Catal. Today*, 169 (2011) 207-216
66. M. Zając, K. Freindl, T. Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki "Electronic and Magnetic Properties of Ultra-thin Epitaxial Magnetite Films on MgO(001)", *Thin Solid Films*, 519 (2011) 5588
67. M. Zaucha, Z. Adamczyk, J. Barbasz "Zeta Potential of Particle Bilayers on Mica: A Streaming Potential Study", *J. Colloid Interface Sci.*, 360 (2011) 195-203
68. J. Zawała, S. Dorbolo, D. Terwagne, N. Vandewalle, K. Małyśa "Bouncing Bubble on Liquid/Gas Interface Resting or Vibrating", *Soft Matter*, 7 (2011) 6719-6726
69. J. Zawała, K. Małyśa "Influence of the Impact Velocity and Size of the Film Formed on Bubble Coalescence Time at Water Surface", *Langmuir*, 27 (2011) 2250-2257

Artykuły ogłoszone z rokiem wydania 2012

1. M. Adamczak, H. J. Hoel, G. Gaudernack, J. Barbasz, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Capsules with Quantum Dots for Biomedical Applications", *Colloids Surf. B*, 90 (2012) 211-216
2. Z. Adamczyk, A. Bratek-Skicki, P. Dąbrowska, M. Nattich-Rak " Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Latex Particles Determined by Zeta Potential and AFM Measurements", *Langmuir*, 28 (2012) 474-485

3. M. Dąbkowska, Z. Adamczyk "Ionic Strength Effect in HSA Adsorption on Mica Determined by Streaming Potential Measurements", *J. Colloid Interface Sci.*, 366 (2012) 105-113
4. M. Krzan, K. Małyś "Influence of Electrolyte Presence on Bubble Motion in Solutions of Sodium n-Alkylsulfates (C8, C10, C12)", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 48 (2012) 49-62
5. J. Mizera, N. Spiridis, R. Socha, M. Zimowska, R. Grabowski, K. Samson, J. Korecki "The Influence of Base Metal (M) Oxidation State in Au-M-O/TiO₂ sSystems on Their Catalytic Activity in Carbon Monoxide Oxidation", *ACS Catalysis*, 2 (2012) 38-55
6. P. Nowak, R. P. Socha, T. Cieślak "Influence of Adsorption on the Charge Transfer Reactions at the Pyrite Surface. Preliminary Study", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 48 (2012) 19-28

Artykuły ogłoszone elektronicznie

1. U. Bazylińska, R. Skrzela, M. Piotrowski, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, K. A. Wilk "Influence of Dicapalic Ionic Surfactant Interactions with Oppositely Charged Polyelectrolyte upon the *in vitro* Dye Release from Oil Core Nanocapsules", *Bioelectrochem.*, DOI:10.1016/j.bioelechem.2011.10.06
2. U. Bazylińska, P. Warszyński, K. A. Wilk "Influence of pH upon *in vitro* Sustained Dye-Release from Oil-Core Nanocapsules with Multilayer Shells", *Colloids Surf. A*, DOI:10.1016/j.colsurfa.2011.12.006
3. Ł. Bratasz, A. Kozłowska, R. Kozłowski "Analysis of Water Adsorption by Wood Using the Guggenheim-Andersen-de Boer Equation", *Eur. J. Wood Prod.*, DOI:10.1007/s00107-011-0571-x
4. J. A. Fedotova, J. Przewoźnik, Cz. Kapusta, M. Milosavljevic, J. V. Kasiuk, J. Zukrowski, M. Sikora, A. A. Maksimenko, D. Szepietowska, K. P. Homewood "Magnetoresistance in FeCoZr-Al₂O₃ Nanocomposite Films Containing 'Metal Core-oxide Shell' Nanogranules", *J. Phys. D-Appl. Phys.*, DOI:10.1088/0022-3727/44/49/495001
5. J. Gurgul, E. Młyńczak, N. Spiridis, J. Korecki "Layer-by-layer Epitaxial Growth of Polar FeO(111) Thin Film on MgO(111)", *Surface Sci.*, DOI:10.1016/j.susc.2011.12.012
6. B. Jachimska, A. Pajor "Physico-chemical Characterization of Bovine Serum Albumin in Solution and as Deposited on Surfaces", *Bioelectrochem.*, DOI:10.1016/j.bioelectroch.2011.009.004
7. L. Jian, S. Q. Yap, S. L. Yoong, T. R. Nayak, G. W. Chandra, W. H. Ang, T. Pańczyk, S. Ramaprabhu, S. K. Vashist, F.-S. Sheu, A. Tan, G. Pastorin "Carbon Nanotube Bottles for Incorporation, Release and Enhanced Cytotoxic Effect of Cisplatin", *Carbon*, DOI:10.1016/j.carbon.2011.11.043
8. W. Płaziński "Sorption of Metal Cations by Alginate-based Biosorbents. On the Correct Determination of the Thermodynamic Parameters", *J. Colloid Interface Sci.*, DOI:10.1016/j.jcis.2011.11.025

9. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Interactions between CD44 Protein and Hyaluronan: Insights from the Computational Study", *Mol. Biosys.*, DOI:10.1039/c2mb05399c
10. M. Szaleniec, A. Salwiński, T. Borowski, J. Heider, M. Witko "Quantum Chemical Modeling Studies of Ethylbenzene Dehydrogenase Activity", *Int. J. Quantum Chem.*, DOI:10.1002/qua.23143

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

1. A. Bielański "Chemia w powiązaniu z innymi naukami", *Niedziałki*, 4 (2011) 73-75 [ISSN 1425-8994]
2. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, M. Mosiałek, G. Mordarski "High Temperature Oxide Electrolytes for Electrochemical Devices Application", *Materiały Ceramiczne*, 62 (2010) 500-505 [printed 2011]
3. M. Dudek, A. Rapacz-Kmita, M. Mroczkowska, M. Mosiałek, G. Mordarski, P. Dudek "Elektrolity stałe w układzie $CeO_2-Sm_2O_3-Nd_2O_3$ ", *Szkło i Ceramika*, 62 (2011) 38-44
4. K. Luberda-Durnaś, V. Matejka, K. Mamulová Kutlaková, W. Łasocha "Simple Methods of Synthesis ZnS Nanoparticles", *J. Phys. Conf. Ser.*, 3 (2011) 1-4
5. A. Micek-Ilnicka "Powierzchnie samooczyszczające się: "efekt liści lotosu" jako przykład biomimetyki", *Niedziałki*, 4 (2011) 75-80 [ISSN 1425-8994]
6. D. Mucha, L. Matachowski, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha "Unique Cation Surroundings in the Structure of $Ag_3PW_{12}O_{40}$ Salt", *ChemInform*, 42 (2011)
7. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Kielkiewicz, A. B. Hendrich "Interaction of Metalloporphyrins with Lipid Bilayers, a Calorimetric study", *Current Topics in Biophysics*, 34 (2011) 11
8. V. P. Pashova, L. G. Mirkowa, M. H. Monev, P. Nowak, G. Nawrat "Ni/Re-Co as Electrocatalytic Material for Hydrogen Evolution Reaction in Alkaline Solution", *Bulgarian Chem. Commun.*, 43 (2011) 64-68
9. W. Płaziński, W. Rudziński, "Kinetyka adsorpcji na granicy faz roztwór/ciało stałe. Znaczenie równań *pseudo-first order* oraz *pseudo-second order*", *Wiad. Chem.*, 29 (2011) 479-486
10. R. P. Socha, M. Lipiński, K. Hejduk "Charakteryzacja metodą XPS warstw azotku krzemu dla ogniw słonecznych", *Elektronika*, 4 (2011) 31-34
11. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Czy nano znaczy skuteczny?", *Style i Charaktery*, 1 (2011) 63 [ISSN 1897-0745]
12. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Dlaczego proszek pierze?", *Style i Charaktery*, 2 (2011) 55 [ISSN 1897-0745]
13. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Kogo gryzą komary?", *Style i Charaktery*, 3 (2011) 53 [ISSN 1897-0745]

14. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Woda życia", Charaktery - magazyn psychologiczny, 8 (2011) 96-99 [ISSN 1427-695X]
15. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Lotne słowa komórek", Charaktery - magazyn psychologiczny, 12 (2011) 92-95[ISSN 1427-695X]
16. J. Waga, J. Zientarki, M. Szaleniec, A. Skoczowski "Efektywność wykorzystania kolumn chromatograficznych typu Poroshell w badaniach białek gliadynowych metodą RP-HPLC", Biul. IHAR, 260-261 (2011) 5-19

ARTYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, Ł. Lasyk, M. Łukomski, B. Rachwał "Allowable Microclimatic Variations for Painted Wood: Numerical Modelling and Direct Tracing of the Fatigue Damage", Preprints 16th Triennial Conf. ICOM Committee for Conservation (J. Bridgland, Ed.), Janet, Lisbon 2011
2. Ł. Bratasz, B. Rachwał, Ł. Lasyk, M. Łukomski, R. Kozłowski, "Analysis of Fatigue Process in Painted Wood", Proc. 177th Symp. on Sustainable Humanosphere, Wood Culture and Science Kyoto 2011, Kyoto 2011, p.37-141
3. Ł. Bratasz, M. Strojceki, A. Klisińska-Kopacz, M. Łukomski "AE and Works of Art", Proc. World Conf. on Acoustic Emission, Beijing 2011, p.581-586
4. A. Dziedzicka, B. Sulikowski "Physicochemical Properties of Natural Clinoptilolite", Book of Abstracts. 18th Zeolite Forum (K. Sadowska, Ed.), Polish Zeolite Association, Kraków 2011, p.35-36 [ISBN 978-83-92-9430-5-1]
5. R. Kozłowski, Ł. Bratasz, Ł. Lasyk, M. Łukomski "Allowable Microclimatic Variations for Painted Wood: Direct Tracing of Damage Development", Proc. Symp. 'Facing the Challenges of Panel Paintings Conservation: Trends, Treatments and Training' (A.S. Chui, A. Phoenix, Eds.). The Getty Conservation Institute, Los Angeles 2011, p.158-164
6. M. Łukomski, Ł. Bratasz, M. Strojceki "Understanding the Response of Painted Wood to the Environmental Impacts - a Path to Rational Strategies for the Collection Care", Proc. 177th Symp. on Sustainable Humanosphere, Wood Culture and Science Kyoto 2011, Kyoto 2011, p.142-147
7. S. Łukasiewicz, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, M. Dziedzicka-Wasylewska "Targeted Delivery System for Therapy of Schizophrenia", Materials. 19th Int. Conf. on Bioencapsulation, Bioencapsulation Research Group, Amboise 2011, p.222-223
8. M. Piotrowski, K. Szczepanowicz, D. Jantas, W. Lasoń, P. Warszyński "Evaluation of Polyelectrolyte-coated Nanoparticles Biocompatibility Against SH-SY5Y Human Neuroblastoma Cells", Materials. 18th Int. Symp. on Microencapsulation, Antalya 2011, p.245-246
9. M. Strojceki, Ł. Bratasz, M. Łukomski "Acoustic Emission for Tracing Damage in Wooden Artworks", Proc. World Conf. on Acoustic Emission, Beijing 2011, p.256-261

10. M. Strojceki, C. Colla, M. Łukomski, E. Gabrielli, Ł. Bratasz "The Kaiser Effect in Wood - Does Historic Wood Have Stress Memory?", Proc. European Workshop on Cultural Heritage Preservation EWCHP-2011 (M. Krüger, Ed.), Fraunhofer IRB Verlag, Berlin 2011, p.171-176 [ISBN 978-3-8167-8560-6]
11. M. Strojceki, M. Łukomski, C. Colla, E. Gabrielli "Acoustic Emission as a Non-destructive Method for Tracing Damage: from Laboratory Testing to Monitoring Historic Structures", Proc. Int. Symp. on Nondestructive Testing of Materials and Structures NDTMS-2011 (O. Buyukozturk, M. A. Tasdemir, O. Gunes, Y. Akkaya, Eds.), RAILEM Bookseries, vol.6 [ISBN 978-94-007-0722-1]
12. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Functional Nanocapsules for Targeted Drug Delivery", Materials. 19th Int. Conf. on Bioencapsulation, Bioencapsulation Research Group, Amboise 2011, p.246-247
13. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Nanocapsules for Targeted Drug Delivery", Materials. 18th Int. Symp. on Microencapsulation, Antalya 2011, p.243-245
14. P. Warszyński, W. Lasoń "Zastosowanie nanotechnologii w neurofarmakologii", in: "Zaawansowane metody badania mózgu", XXVIII Zimowa Szkoła Instytutu Farmakologii PAN (M. Dziedzicka-Wasylewska, Ed.), Kraków 2011, p.43-53
15. D. Wilk, Ł. Bratasz, R. Kozłowski "Acoustic Emission for Monitoring Crack Formation in Roman Cement Mortars", Proc. European Workshop on Cultural Heritage Preservation EWCHP-2011 (M. Krüger, Ed.), Fraunhofer IRB Verlag, Berlin 2011, p.177-181 [ISBN 978-3-8167-8560-6]
16. M. Zimowska, R. Dula, B. Napruszewska, R. P. Socha, J. Gurgul, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Superior Catalytic Properties of the Copper-manganese Spinel in Total Combustion of Toluene over Cu-Mn-Al Mixed Oxides Derived from Hydrotalcite Type Compounds", Programme and Abstracts Book. 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011, p.190
17. M. Zimowska, H. Pálková, J. Madejová, E. Bielańska, L. Lityńska-Dobrzyńska, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka "Various Aspects of Synthesis and Properties of the Laponite-derived Porous Clay Heterostructures", Book of Abstracts. 18th Zeolite Forum (K. Sadowska, Ed.), Polish Zeolite Association, Kraków 2011, p.103-104 [ISBN 978-83-92-9430-5-1]

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. M. Adamczak, H. J. Hoel, G. Gaudernack, J. Barbasz, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Capsules with Quantum Dots for Biomedical Applications", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011 [ISBN 978-83-62139-23-1]
2. Z. Adamczyk "Elektrokinetic Studies of Colloid and Protein Adsorption on Solid/electrolyte Interfaces", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011, p.97 [ISBN 978-83-62139-23-1]

3. Z. Adamczyk "Mechanism of Colloid and Protein Adsorption. Facts and Myths", Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
4. Z. Adamczyk, M. Nattich-Rak, M. Sadowska, M. Wasilewska "Fibrinogen Monolayers on Mica Studied via the Streaming Potential and Colloid Deposition Methods, Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
5. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Colloid Enhancement of Protein Layers: Fibrinogen on Mica, Streszczenia. 5. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO 2011, Politechnika Gdańska, Gdańsk 2011
6. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Determining Mechanism of Fibrinogen Adsorption on Mica via AFM, Streaming Potential and Colloid Enhancement Measurements", Book of Abstracts. Workshop of COST Action D43 Functionalized Materials and Interfaces, Madrid 2011
7. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Colloid Enhancement of Protein Layers: Fibrinogen on Mica", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.314 [ISBN 978-83-62139-23-1]
8. K. Bahranowski, A. Michalik-Zym, M. Zimowska, E. M. Serwicka, Z. Olejniczak, L. Lityńska, M. Bazarnik "Synthesis, Physico-chemical Characterization and Catalytic Properties of Aluminated Mesoporous Silicas of FSM-16 Type", Book of Abstracts. European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011, p.355
9. P. Batys, P. Weroński "Charakterystyka struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek kulistych", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IKiFP PAN, Kraków 2011 [ISBN 978-83-60514-14-6]
10. U. Bazylińska, R. Skrzela, K. Szczepanowicz, p. Warszyński "Influence of Polyelectrolyte-type upon *in vitro* Release Profiles of Multilayeroil-cored Nanocapsules", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.267 [ISBN 978-83-62139-23-1]
11. E. Bielańska, M. Zimowska, I. Nazarczuk, M. Kozicki, M. Najbar "SEM-EDS Studies of Transition Metal Catalysts for NO Decomposition", Book of Abstracts. Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011, p.119-120 [ISBN 978-83-233-3249-7]
12. T. Borowski, A. Wójcik, A. Miłaczewska, M. Radoń "Oxoferryl Species in Mononuclear Nonheme Iron Enzymes: Biosynthesis, Properties and Reactivity from Theoretical Perspective", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IKiFP PAN, Kraków 2011 [ISBN 978-83-60514-14-6]
13. A. Bratek-Skicki, Z. Adamczyk, P. Dąbrowska, M. Nattich-Rak "Electrokinetic Studies of Fibrinogen Adsorption on Latex Particles" Book of Abstracts. Conf. on Polymers for Advanced Technologies, Łódź 2011

14. E. Brocławik, M. Radoń, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka "Charge Transfer versus Substrate Binding and Activation by Cationic Sites in Zeolites: ETS-NOCV Perspective", Book of Abstracts. 4th Int. Symp. Methods and Applications of Computational Chemistry, Lviv Kharkiv 2011, p.43
15. E. Brocławik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj J. Datka "Charge Transfer in Substrate Binding and Activation by Cationic Sites in Zeolites: ETS-NOCV Perspective", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IkiFP PAN, Kraków 2011, p.5 [ISBN 978-83-60514-14-6]
16. E. Brocławik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka "Nowe spojrzenie na adsorpcję i aktywację substratu przez centra kationowe w zeolitach: perspektywa ETS-NOCV", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.28 [ISBN 978-83-60514-13-9]
17. M. Derewiński "Hierarchical Porous Materials - from Basic Research to Applications", Abstracts. 6th Russian Zeolite Conf. 'Zeolites and Mesoporous Materiale: Achievements and Perspectives', Zvenigorod 2011
18. M. Derewiński "Advanced Environmental Applications Using Porous Materials, Including "Clean Water"", Abstracts. ENMIX/EMH Workshop 'Novel Materials for Future Enegry Supply and a Clean Environment', Vatnahalsen 2011
19. M. Derewiński "Effect of Washing on Properties of Phosphorous Modified HZSM-5 Zeolite", Book of Abstracts. 5th Int. FEZA Conf., Valencia 2011, p.181
20. M. Derewiński, J. Podobiński, P. Sarv "Odwracalna modyfikacja zeolitu typu MFI kwasem ortofosforowym", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.160 [ISBN 978-83-60514-13-9]
21. M. Derewiński, P. Sarv "Is Modification of HZSM-5 Zeolite with Phosphorous Irreversible?", Book of Abstracts. 4th Int. Symp. 'Advanced Micro- and Mesoporous Materials' (P. Petrova, Ed.), Riviera resort 2011, p.16 [ISBN 1314-4375]
22. M. Długosz, D. Drozd, M. Szaleniec, K. Szczubiałka, M. Nowakowska "Photodegradation of Selected Water Pollutants Using Hybrid Photocatalysts", Materiały Konf. Polymers on the Odra River, Opole 2011, p.22
23. A. Dobija, W. Nitek, W. Łasocha "Kompleksy peroksomolibdenianowe z kwasem nikotynowym – badania strukturalne i właściwości fizykochemiczne", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.122 [ISBN 978-83-60514-13-9]
24. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik "Manganese Porphyrins as Versatile Catalysts for Hydrocarbon Oxidation", Book of Abstracts. 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011, SO27

25. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Aktywne formy porfiryny manganu – katalizatora w reakcjach utleniania", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IkiFP PAN, Kraków 2011, p.50 [ISBN 978-83-60514-14-6]
26. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Hydrogen Peroxide as Oxidant in Biomimetic Catalysis by Porphyrins", Program and Abstracts. 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conf., Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, Prague 2011, p.88
27. A. Dudzik, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Dehydrogenaza (S)-1-fenyletanolowa – stereospecyficzna redukcja ketonów do alkoholi", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.32 [ISBN 978-83-60514-13-9]
28. A. Dudzik, K. Szymańska, A. Jarzębski, M. Tataruch, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "Biocatalytic Ketone Reduction - Production of Chiral Alcohols with (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", Materiały Zjazdowe. 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011, p.359 [ISBN 978-83-60988-08-4]
29. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, R. Socha, L. Lityńska-Dobrzyńska "Preparation, Characterization and Catalytic Application of Ru Catalysts Supported on Amine Groups Functionalized Polymer, Book of Abstracts. 2nd Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Strasbourg 2011
30. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Drelinkiewicz, M. Zimowska, R. Socha, Z. Olejniczak "Osadzanie fosfinowego kompleksu Ru(II) na mezoporowatej krzemionce typu FSM-16. Charakterystyka fizykochemiczna i badania katalityczne w reakcji uwodornienia fenylacetenu", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.50 [ISBN 978-83-60514-13-9]
31. J. Dziedzic, K. Szczepanowicz, P. Nowak, P. Warszyński "Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany utleniaczami", Materiały Konferencyjne. 1. Symp. 'Postępy w badaniach i zastosowaniach fotokatalizatorów na bazie ditlenku tytanu (TiO₂-Szczecin 2011)', Szczecin 2011, p.7
32. J. Dziedzic, K. Szczepanowicz, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszyński "The Effect of Chemical Oxidants Released from Capsules in the Photodegradation Process of the Humic Substances", Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sandomie 2011, p.48
33. K. Freindl, M. Zając, T. Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, K. Matlak, E. Madej, E. Partyka-Jankowska, J. Korecki, "Comparison of Oxygen Adsorption on Fe(110) Surface and Fe(110)/W(110) Monolayer", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-3
34. T. Giela, K. Freindl, N. Spiridis, J. Korecki "Au Films on W(110): Reconstruction and Dislocations", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-4
35. B. Gil, B. Marszałek, A. Micek-Ilnicka, Z. Olejniczak "Wpływ Si/Al na dystrybucję atomów Al w zeolitach MWW", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.159 [ISBN 978-83-60514-13-9]

36. R. Gryboś, J. Handzlik "Periodyczne obliczenia DFT dla pełnej komórki ZSM-5", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.114 [ISBN 978-83-60514-13-9]
37. M. Grzesiak, D. Mucha, W. Nitek, W. Łasocha "Synteza i właściwości fizykochemiczne wybranych soli kwasów dikarboksylowych", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.125 [ISBN 978-83-60514-13-9]
38. J. Gurgul, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, J. Przewoźnik, N. Spiridis, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki "Exchange-bias in Epitaxial CoO/Fe Bilayer Grown on MgO(001)", Book of Abstracts, TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-5
39. J. Gurgul, L. Matachowski, R. P. Socha, M. Zimowska "Wpływ składu powierzchni soli $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ i $\text{Ag}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ na ich aktywność katalityczną w reakcji odwodnienia etanolu", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.83 [ISBN 978-83-60514-13-9]
40. J. Gurgul, L. Matachowski, R. P. Socha, M. Zimowska "The Influence of Surface Composition of $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ and $\text{Ag}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ Salts on Their Catalytic Activity in Dehydration of Ethanol", Programme and Abstracts Book. 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011, p.182
41. J. Gurgul, E. Młyńczak, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, J. Przewoźnik, N. Spiridis, T. Ślęzak, J. Korecki "Interplay between Structure and Magnetic Properties of CoO-Fe Exchange-bias Systems", Programme and Abstracts Book. 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011, p.212
42. J. Gurgul, E. Młyńczak, N. Spiridis, J. Korecki "Layer-by-layer Epitaxial Growth of Polar FeO(111) Thin Film on MgO(111)", Book of Abstracts, TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-6
43. J. Gurgul, E. Młyńczak, N. Spiridis, J. Korecki "Layer-by-layer Epitaxial Growth of Polar FeO(111) Thin Film on MgO(111)", Programme and Abstracts Book. 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011, p.267
44. J. Hartwich, B. Jachimska, W. Drożdż, Ł. Partyka, R. Wiaderkiewicz "Fasting and Postprandial Triglyceride-rich Lipoprotein Particle Subclass Analysis by Dynamic Light Scattering. The Pilot Study", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011, p.272 [ISBN 978-83-62139-23-1]
45. B. Jachimska, A. Pajor "Physico-chemical Characterization of BSA (Conformational Stability, Shape and Effective Charge) and Deposition at Mica Surfaces", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011, p.396 [ISBN 978-83-62139-23-1]
46. B. Jachimska, S. Zapotoczny, "Characteristics and Properties of PAMAM Dendrimers", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011, p.325 [ISBN 978-83-62139-23-1]

47. B. Jachimska, M. Zembala, S. Zapotoczny, Z. Adamczyk "Combining Streaming Potential and AFM Measurements to Estimate Effective Surface Charge of PAMAM Dendrimers", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.326 [ISBN 978-83-62139-23-1]
48. E. Jamróz, G. Para, B. Jachimska, A. Para "The Interfacial Properties of Protein/Furcellarane Systems", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.388 [ISBN 978-83-62139-23-1]
49. E. Jamróz, G. Para, B. Jachimska, A. Para "Kompleksy białek z fulceranem jako elementy budowy nanostruktury", in: "Rola dokonań młodych naukowców a możliwości sukcesu naukowego i zawodowego", Monografie 2011, Uniwersytet Rolniczy, Kraków 2011, vol. II, p.131-134
50. J. Janas, W. Rojek, S. Dźwigaj "Effect of C₁ and C₂ Organic Reducing Agents on Selective Catalytic Reduction of NO on FeSiBEA and CoSiBEA Zeolites", Book of Abstracts. Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011, p.43-44 [ISBN 978-83-233-3249-7]
51. E. Jarek, M. Krzan, A. Pajor, M. Orlof, K. Czapla, L. Szyk-Warszyńska, B. Korchowiec, P. Warszyński "Enzymes as Nanotools - Analysis of the Enzymatic Reaction Occurring in Phospholipid Layers at Liquid/Gas and Liquid/Solid Interfaces", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.107 [ISBN 978-83-60514-13-9]
52. J. Józwik, R. Grabowski, Z. Bojar "Catalytic Properties of Thin Ni₃Al Nano- and Microcrystalline in Methanol Decomposition", Mater. Annual Int. Conf. on Materials, Science, Metal and Manufacturing M3 2011, Global Science and Technology Forum, Singapore 2011
53. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, B. Napruszewska, R. Dula, E. M. Serwicka "Synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne miedziowych soli heteropolikwasów", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.54 [ISBN 978-83-60514-13-9]
54. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, P. Nowak, E.M. Serwicka "Porównanie aktywności katalitycznej kompleksów salenowych, porfirynowych i ftalocyjaninowych, zawierających żelazo lub mangan w reakcji utleniania fenolu", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.103 [ISBN 978-83-60514-13-9]
55. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, M. Szaleniec, E. M. Serwicka "Utlenianie cykloheksenu tlenem molekularnym w obecności heteropolianionów PW12 i PMo12 dotowanych substytucyjnie Co, Mn, Fe", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.104 [ISBN 978-83-60514-13-9]
56. M. Kolasińska-Sojka, S. Wojtyła, P. Warszyński "Electroactive Properties of Prussian Blue Nanoparticles Embedded in Polyelectrolyte Multilayer", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.354 [ISBN 978-83-62139-23-1]

57. J. Korecki "Polar Iron Oxide Films on Pt(111)", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, O-18
58. D. Kosior, J. Zawała, M. Krasowska, K. Małysa "Influence of Surface Roughness and Concentration of Surface Active Substances on Kinetics of the Bubble Attachment to Hydrophobic Solid", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.313
59. D. Kosior, J. Zawała, K. Małysa, "Role of "Entrapped" Air at the Hydrophobic Solid Surface in Kinetics of the Three Phase Contact Formation", Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011, p.66
60. R. Kosydar, E. Lalik, J. Gurgul, A. Drelinkiewicz "Wpływ promotorów K, Cs, Na, Li na aktywność katalizatora 2 %Pd/Al₂O₃ w reakcji uwodorniania 2-etyloantrachinonu", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.56 [ISBN 978-83-60514-13-9]
61. B. Kozik, Ż. Ługowska, M. Wytrwał, M. Szaleniec, A. Dudzik, K. Jamroży "Enantioselective Synthesis of Indan- and Tetrahydronaphthalenediol Based on 1-(4-Hydroxyphenyl)ethanol Framework", Book of Abstracts. 3rd Int. Environmental Best Practices Conf. EBP-3, Offenburg 2011, p.78
62. A. Koziół, E. Młyńczak, K. Matlak, N. Spiridis, K. Freindl, D. Wilgocka-Ślęzak, T. Ślęzak, M. Ślęzak, J. Korecki "Room Temperature Perpendicular Magnetic Anisotropy in Epitaxial [Fe/MgO]_N Multilayers", Book of Abstracts. Workshop on Novel Trends in Optics and Magnetism of Nanostructures, Augustów 2011, p.58
63. A. Koziół-Rachwał, K. Freindl, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Korecki, J. Korecki, "IEC in Epitaxial Fe/MgO/Fe Multilayers", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, O-16
64. M. Krasowska, M. Ferrari, L. Liggieri, K. Małysa "Wetting Properties and Air Entrapment at Superhydrophobic Surfaces in n-Alkanols Solutions", Workshop of COST Action D43 Functionalized Materials and Interfaces, Madrid 2011
65. T. Kruk, K. Szczepanowicz, B. Malinowska, M. Kolasińska, P. Warszyński "Wielowarstwowe cienkie filmy jako powłoki o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych", Materiały. 54. Zjazd PTChem i SITPChem Lublin 2011, p143
66. M. Krzan, E. Jarek, A. Chrzanowska, P. Warszyński, K. Małysa "Fast Method for Detection of Water Soluble Surface-active Products of Enzymatic Reaction by Monitoring the Bubble Velocity Variations", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.333 [ISBN 978-83-62139-23-1]
67. M. Krzan, K. Małysa "Influence of Electrolyte on Velocity of the Bubbles Rising in Solutions of Sodium n-Alkylsulfates (C8, C10, C12)", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.253

68. K. Kubiak, Z. Adamczyk, M. Oćwieja "Stability of Silver Nanoparticle Monolayers", Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
69. M. Łukomski, B. Rachwał, Ł. Bratasz, R. Kozłowski "*In situ* Monitoring of the Impact of Microclimatic Fluctuations on Polychrome Wood: a Path to Rational Strategy for the Collection Care", Mater. Joint Final Conference of COST Actions IE0601 and MP0601, Paris 2011
70. E. Madej, R. P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki "Bimetallic Au-Fe Clusters on TiO₂(110)", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, O-21
71. E. Madej, R. P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki "CO Adsorption on AuFe and FeAu Bimetallic Clusters Deposited on TiO₂(110)", Conf. Mater. COST Action D36 Final Workshop 'Structure Performance Relationships in Functional Materials: Catalysis, Electrochemistry and Surfactants', Fuengirola 2011, p.79-80
72. K. Matlak, A. Koziół-Rachwał, M. Ślęzak, T. Ślęzak, K. Freindl, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki "Room Temperature Perpendicular Magnetic Anisotropy in eEpitaxial [Fe/MgO]_N Multilayers", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-9
73. A. Micek-Ilnicka, A. Bielański, E. Bielańska "Nanorurki węglowe, jako nośniki heteropolikwasów, katalizujących konwersję alkoholu etylowego", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.68 [ISBN 978-83-60514-13-9]
74. A. Micek-Ilnicka, A. Bielański, B. Gil "Heteropolyacid-MOF Systems as the Novel Catalysts in Ethanol Conversion", Book of Abstracts. 18th Zeolite Forum (K. Sadowska, Ed.), Polish Zeolite Association, Kraków 2011, p. 65 [ISBN 978-83-92-9430-5-1]
75. A. Michalik-Zym, M. Zimowska, B. D. Napruszewska, R. Dula, E. Bielańska, D. Mucha, E. M. Serwicka "Rozwinięcie powierzchni mieszanych tlenków CuMnAl (1:2:1) otrzymanych metodą hydrotalkitową jako funkcja składu fazowego i stopnia krystaliczności prekursora", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.136 [ISBN 978-83-60514-13-9]
76. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski "Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase from DFT Calculations", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011, p.395 [ISBN 978-83-62139-23-1]
77. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski " Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase from DFT Calculations", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IkiFP PAN, Kraków 2011 p.48 [ISBN 978-83-60514-14-6]
78. J. Mizera, N. Spiridis, R. Socha, R. Grabowski, K. Samson "Katalizatory Au/FeO_x o różnym stopniu utlenienia żelaza w procesie utleniania CO", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.14 [ISBN 978-83-60514-13-9]

79. J. Mizera, N. Spiridis, R. Socha, R. Grabowski, K. Samson, J. Korecki, B. Grzybowska "AuFeO_x Catalysts with Different Iron Oxidation State in Oxidation of CO", Conf. Mater. COST Action D36 Final Workshop 'Structure Performance Relationships in Functional Materials: Catalysis, Electrochemistry and Surfactants', Fuengirola 2011, p.73-74
80. E. Młyńczak, J. Gurgul, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, J. Przewoźnik, N. Spiridis, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki "Structure and Magnetic Properties of Fe-CoO Bilayers" Book of Abstracts, TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, O-4
81. M. Morga, Z. Adamczyk, G. Para "The Behavior of Colloid Zirconia and Colloid Silica in the Presence of Fluorine Surfactants, Improvement of Wetting Properties", Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
82. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński "Modifications of Wetting Properties of Colloid Silica Binders Using Fluorine Surfactants", Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
83. M. Mosiałek, M. Dudek, E. Bielańska, R. P. Socha, G. Mordarski, J. Barbasz, A. Rapacz-Kmita "Silver Electromigration During Prolongated Negative Potential in the Ag|8ysz Halfcell, AFM, SEM and XPS Study", Mater. Konf. 18th Int. Conf. on Solid State Ionics, Warszawa 2011, p.131
84. M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Dudek, R. P. Socha, A. Rapacz-Kmita "Ionic Conductivity in the CeO₂-Gd₂O₃-BaO System", Mater. Konf. 12th Conf. on Composites and Ceramic Materials - Technology, Application and Testing (E-MRS Conf.), Białowieża 2011, p.24
85. M. Najbar, E. Pałkowska, J. Dutkiewicz, I. Nazarczuk, L. Lityńska-Dobrzyńska, E. Bielańska, A. Weselucha-Birczyńska, W. Łasocha, J. Camra, M. Kozicki "Simultaneous NO Reduction and Soot Oxidation on Transition Metal Oxide Catalyst", Book of Abstracts. Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011, p.25 [ISBN 978-83-233-3249-7]
86. B. D. Napruszewska, R. Dula, M. Zimowska, E. M. Serwicka "Optymalizacja syntezy układów Zn-Al typu hydrotalkitu o wysokiej zawartości cynku", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.137 [ISBN 978-83-60514-13-9]
87. A. Niecikowska, M. Krasowska, J. Ralston, K. Małyś "Role of Surface Charge and Hydrophobicity in Formation of Three Phase Contact at Titania Surface", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.360
88. A. Niecikowska, J. Zawała, K. Małyś "Influence of Bubble motion in n-Hexadecyltrimethylammonium Bromide on Kinetics of the Bubble Attachment to Mica Surface", Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011, p.81
89. P. Niemiec, R. Tokarz-Sobieraj "Electronic Structure of Tungsten and Molybdenum Heteropolyacids with Different Central Ions. Cluster DFT calculations", Book of Abstracts. 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011, S07

90. P. Niemiec, R. Tokarz-Sobieraj "Struktura elektronowa heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych z różnymi jonami centralnymi. Obliczenia klasterowe DFT", Book of Abstracts. Konf. "Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011", IKiFP PAN, Kraków 2011, p.43 [ISBN 978-83-60514-14-6]
91. M. Nosek, P. Weroński, P. Nowak "Ion Transport through Multilayers of Colloidal Particles", Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
92. N. Nosidlak, R. P. Socha, D. Wodka, A. Daniel, J. Nizioł, J. Sanetra "Wpływ nanocząstek na właściwości ogniw fotowoltaicznych zbudowanych na bazie P3OT". Materiały Konferencyjne. 2. Krajowa Konferencja Fotowoltaiki, Krynica-Zdrój 2011, p.111-116
93. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga "Kinetyka adsorpcji oraz struktura monowarstw nanocząstek srebra na powierzchniach heterogenicznych", Streszczenia. 6. Krakowska Konf. Młodych Uczonych, Kraków 2011
94. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "High Density Silver Monolayers Produced by Colloid Self-assembling on Polyelectrolyte Supporting Layers", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.152 [ISBN 978-83-60514-13-9]
95. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Functional Silver Nanoparticle Monolayers Produced by Colloidal Self-assembling-Characteristic and Morphology", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.342 [ISBN 978-83-62139-23-1]
96. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Influence of Ionic Strength on Silver Particle Monolayer Structure and Density", Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
97. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Silver Nanoparticles Monolayers on Polyelectrolyte Covered Mica Produced by Self-assembly", Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
98. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Tuning Silver Particle Monolayer Structure and Density via Controlled Adsorption-desorption Processes", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
99. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Monowarstwy nanocząstek srebra o kontrolowanej strukturze i stopniu pokrycia otrzymywane w procesach samoorganizacji w warunkach dyfuzyjnych", Streszczenia. 5. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO 2011, Politechnika Gdańska, Gdańsk 2011
100. B. Olbromska, A. Koziół-Rachwał, K. Freindl, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Korecki, J. Korecki "Magneo-optic Kerr Effect Imaging of the Magnetization Reversal in Fe/MgO/Fe Trilayers", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-11

101. B. Olbromska, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, P. Korecki, J. Korecki "Influence of Epitaxial MgO Buffer Layer on Magnetic and Transport Properties of Fe/MgO/Fe Trilayers", Programme & Abstracts Book. European Conf. on Surface Science ECOSS 28, Wrocław 2011, p.117
102. K. Onik, J. Podobiński, E. Włoch, M. Derewiński "Wykorzystanie cząstek koloidalnych w syntezie nowych materiałów warstwowych", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.138 [ISBN 978-83-60514-13-9]
103. Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik, B. Szmyd, T. Szumelda, L. Fiedor, G. Stochel "Mechanistic Studies on Chlorophyll Degradation Processes", Book of Abstracts. 11th Symp. on Applied Bioinorganic Chemistry, Barcelona 2011, P93
104. A. Pacuła, K. Uosaki, K. Ikeda "New Hybrid Materials Containing Cobalt Particles and Nitrogen-doped Nanostructured Carbon Obtained by Catalytic Chemical Vapour Deposition Route", Conf. Materials. MANA International Symp., Tsukuba 2011, p.101
105. A. Pacuła, K. Uosaki "Novel Composites Containing Nitrogen-doped Nanostructures Carbon and Cobalt as Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction", Conf. Materials. 62nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Niigata 2011
106. A. Pacuła, R. P. Socha, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska "Synthesis, Characterization and Testing of Electroactive Composites Containing Cobalt Species Deposited on N-doped Nanostructured Carbon", Programme and Abstracts Book. 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
107. A. Pajor, M. Kolańska-Sojka, S. Wojtyła, P. Warszyński "Electroactive Multilayer Films Formed from Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.83
108. A. Pajor, P. Warszyński "Electroactive Multilayer Films of Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles and Its Application for H₂O₂-sensors", Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011, p.85
109. H.Pálková, E. Jankovič, M. Zimowska, J. Madejová "Dissolution of the Surfactants-modified Montmorillonite in HCl - Stability Studies", Book of Abstracts. European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011, p.348
110. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Kielkiewicz, A. B. Hendrich "Calorimetric Study of Interaction of Metalloporphyrins with Lipid Bilayers", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.153 [ISBN 978-83-60514-13-9]
111. T. Pańczyk "Crucial Prerequisites for a Functional Magnetically Triggered Nanocontainer", Materiały Zjazdowe. 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011 [ISBN 978-83-60988-08-4]
112. T. Pańczyk, T. P. Warzocha "A Magnetically Controlled Nanocontainer as a Drug Delivery System. Monte Carlo Predictions of Its Properties", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IkiFP PAN, Kraków 2011 [ISBN 978-83-60514-14-6]

113. G. Para, A. Hamerska-Dudra, K. A. Wilk, P. Warszyński "Mechanism of Cationic Surfactant Adsorption – Effect of Molecular Structure and Multiple Charge", *Colloids Surf A*, 383 (2011) 67-72
114. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Stability of "Wet" and "Dry" PLL/Casein Multilayers", *Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce*, Sudomie 2011, p.19
115. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Thickness and Stability of PLL/Casein Multilayers Investigated by Ellipsometry and QCM", *Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011*, p.281 [ISBN 978-83-62139-23-1]
116. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Stability of PLL/Casein Multilayer Films in the Aqueous Media with Different pH", *Book of Abstracts. 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011*, p.88
117. M. Piotrowski, K. Szczepanowicz, D. Jantas, W. Lasoń, P. Warszyński "Evaluation of Neuroprotective Action of Nanoencapsulated Calpain Inhibitor - MDL 28170", *Abstracts. 3rd Int. Conf. NANOCON 2011, Brno 2011*, p.106
118. J. Plona, D. Mucha, R. P. Socha, R. Dula, E. M. Serwicka "Zirconium and Gallium as Modifiers Enhancing Catalytic Activity of Cu/ZnO/Al₂O₃ System in the Synthesis of Methanol", *Book of Abstracts. 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011*, SO22
119. J. Plona, M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalin-Zym, T, Machej, Ł. Mokrzycki, E. M. Serwicka "Rola cyrkonu i galu jako modyfikatorów zwiększających aktywność katalityczną układu Cu/ZnO/Al₂O₃ w syntezie metanolu", *Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011*, p.101 [ISBN 978-83-60514-13-9]
120. W. Płaziński "The Structure of Calcium Alginate Hydrogels at the Molecular Level. A Computer Simulation Study", *Nano Biomedicine*, 3 (2011) 90
121. W. Płaziński "Molecular Modeling of Interactions between Alginate Chains and Bivalent Metal Ions: Computational and Thermodynamic Aspects", *Nano Biomedicine*, 3 (2011) 172
122. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Oddziaływania białka CD44 z hialuronianem. Symulacje metodą dynamiki molekularnej", *Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IKiFP PAN, Kraków 2011* [ISBN 978-83-60514-14-6]
123. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Interactions between CD44 Protein and Hyaluronan: Insights from the Molecular Modeling Study", *Książka abstraktów.4. Konwersatorium Chemii Medycznej. Lublin 2011*
124. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Interactions of Hyaluronan with CD44 Protein: A Molecular Dynamics Study", *Książka abstraktów. Conf. 'Relationship of Numerical Simulations and Experimental methods', Warszawa 2011*

125. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Zastosowanie pakietu oprogramowania *Gromacs* do symulacji metodami dynamiki molekularnej", Materiały Zjazdowe. 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011 [ISBN 978-83-60988-08-4]
126. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Hyaluronan Binding by CD44: a Preliminary Molecular Dynamics Study", Book of Abstracts. Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej PTChem, Murzasichle 2011
127. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Wykorzystanie dynamiki molekularnej do badania oddziaływań międzycząsteczkowych na przykładzie układu CD44-HA", Materiały Zjazdowe. 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011 [ISBN 978-83-60988-08-4]
128. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Dynamika molekularna", Książka abstraktów. 5. Kopernikańskie Seminarium Doktoranckie. Toruń 2011
129. W. Płaziński, W. Rudziński "Molecular and Macroscopic Modeling of Interactions between Alginates and Metal Ions", Book of Abstracts. Conf. 'Understanding Molecular Simulations. MolSim 2011', Amsterdam 2011
130. J. Połtowicz, K. Pamin, B. Jachimska, K. Onik, R. Grabowski "Macrocyclic Complexes on Natural Polysaccharides as Catalysts in Oxidation of Cyclooctane", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.158 [ISBN 978-83-60514-13-9]
131. W. Rudziński "Fundamentals of the Theoretical Description of Adsorption Kinetics Based on the Statistical Rate Theory", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IKiFP PAN, Kraków 2011 [ISBN 978-83-60514-14-6]
132. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, J. Kołacz, R. Grabowski "Zależności OCV jednokomorowego ogniwa paliwowego Au/YSZ/Pt od składu równowagowej mieszanki zasilającej ($\text{CH}_4 + \text{O}_2$) z uwzględnieniem wydzielania się węgla", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.154 [ISBN 978-83-60514-13-9]
133. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, J. Kołacz, R. Grabowski "Dependencies of the Open-circuit Voltage of Au|YSZ|Pt Single-chamber Fuel Cell on the Composition of the Uniform $\text{CH}_4 + \text{O}_2$ Gas Mixture with Solid Carbon Deposition", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.351 [ISBN 978-83-62139-23-1]
134. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "Badania nad aktywacją węglowodorów przez ligandy aksjalne porfiryn", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.115 [ISBN 978-83-60514-13-9]
135. D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Formation of Oxocarbides from MoO_3 . DFT Studies", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.116 [ISBN 978-83-60514-13-9]

136. D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "DFT Description of Geometry and Electronic Properties of Molybdenum (Oxo)carbides", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IKiFP PAN, Kraków 2011, p.49 [ISBN 978-83-60514-14-6]
137. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, A. Kania "How Do Chelating Ligands Influence Coordination Properties of Mg^{2+} ?", Program & Book of Abstracts. Conf. Modeling Interactions in Biomolecules V (J. Burda, Ed.), MATFYZPRESS Publishing House, Prague 2011, p.54 [ISBN 978-80-7378-180-4]
138. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "DFT Studies on Catalytic Activity of Manganese Porphyrins", Book of Abstracts. 15th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Berlin 2011, p.105
139. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "Manganese Porphyrins as Versatile Oxidation Catalysts - DFT Studies", Book of Abstracts. 10th Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Toruń 2011, p.97
140. A.Sobczak-Kupiec, D. Malina, Z. Wzorek, M. Zimowska "Influence of Silver Nitrate Concentration on the Properties of Silver Nanoparticles, Book of Abstracts. Int. Congr. & Exhibition on Nanobiotechnology NanoBio-Europe 2011, Cork 2011, P-10
141. R. Socha, M. Lipiński, K. Hejduk "Charakteryzacja metodą XPS warstw azotku krzemu dla ogniw słonecznych", Materiały Konferencyjne. 2. Krajowa Konferencja Fotowoltaiki, Krynica-Zdrój 2011, p.45-50
142. R. P. Socha, E. Madej, N. Spiridis, J. Korecki "Electronic State of Au Adsorbed on Defected MgO(100) Surfaces", Conf. Mater. COST Action D36 Final Workshop 'Structure Performance Relationships in Functional Materials: Catalysis, Electrochemistry and Surfactants', Fuengirola 2011, p.199-200
143. R. P. Socha, M. Szczepanik, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Synthesis of Epitaxial Layers of Mixed Fe_xMn_yO Oxides on MgO(001)", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-14
144. R. P. Socha, M. Szczepanik, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Synthesis of Epitaxial Layers of Mixed $Fe_xMn_{1-x}O$ on MgO(001)", Programme and Abstracts Book. 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011, p.268
145. N. Spiridis, K. Freindl, W. Karaś, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, J. Korecki "Surface Electronic Properties of Fe(001) Probed via Hyperfine Interactions", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-7
146. N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, B. Figarska, J. Korecki "STM Studies of Gold Nanostructures on Vicinal FeO/Pt(997) Surface", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-2,

147. N. Spiridis, M. Zając, D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, A. Kozioł-Rachwał, M. Ślęzak, T. Ślęzak, J. Korecki "Dynamic Properties of Ultrathin FeO on Pt(111) Studied with Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", Programme & Abstracts Book. European Conf. on Surface Science ECOSS 28, Wrocław 2011, p.176
148. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "QM:MM Study of the Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase", Conf. Materials. Biological Transformation of Hydrocarbons - DFG Priority Programme 1319 Meeting, Herrsching/Ammersee 2011
149. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "The Influence of the Protein Environment on the Oxidation of Ethylbenzene by Ethylbenzene Dehydrogenase - a QM:MM Study", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.33 [ISBN 978-83-60514-13-9]
150. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, D. Knack, J. Heider "QM:MM Study of the Ethylbenzene Dehydrogenase Reaction Mechanism and Enantioselectivity", Materials 2011 Molybdenum and Tungsten Enzyme Conf., Edmonton 2011, p.47
151. M. Szaleniec, A. Dudzik, M. Witko, M. Tataruch, J. Heider "Enantioselectivity and Reactivity of Ethylbenzene Dehydrogenase", Materials 2011 Molybdenum and Tungsten Enzyme Conf., Edmonton 2011, p.48
152. M. Szaleniec, A. Salwiński, T. Borowski, M. Witko "Prediction of Ethylbenzene Dehydrogenase Activity with Quantum Chemical Modeling", Program and Abstracts. 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conf. QBIC 2011, Cesky Krumlov 2011, p.52
153. M. Szaleniec, A. Salwiński, T. Borowski, M. Witko "Prediction of Ethylbenzene Dehydrogenase Activity with Quantum Chemical Modeling", Book of Abstracts. Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', IKiFP PAN, Kraków 2011, p.47 [ISBN 978-83-60514-14-6]
154. M. Szczepanik, R. P. Socha, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Synteza i właściwości epitaksjalnych warstw tlenków manganu na MgO(001)", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.155 [ISBN 978-83-60514-13-9]
155. K. Szczepanowicz, H. J. Hoel, G. Gaudernack, P. Warszyński "Functionalized Polyelectrolytes Nanocapsules with Emulsion Core for Targeted Drug Delivery", Abstracts. 1st Int. Symp. on Colloids and Materials, Amsterdam 2011, p.1.14
156. K. Szczepanowicz, T. Kruk, M. Kolańska, J. Stefańska, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Thin Films with Antimicrobial Properties", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p 480
157. K. Szczepanowicz, T. Kruk, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Functional Nanocapsules for Targeted Drug Delivery", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.478

158. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziejzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Targeted Delivery System for Therapy of Schizophrenia", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.479
159. K. Szczepanowicz, B. Martins, M. F. Montemor, P. Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Containing MBT Inhibitor for Corrosion Protection of AA2014 Alloys, Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.477
160. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, P. Warszyński "Stability of PLL/Casein Multilayer Films in the Aqueous Media with Various pH Analyzed by Ellipsometry and QCM", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.T640
161. M. Ślęzak, A. Kozioł-Rachwał, K. Matlak, T. Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki "Growth and Spin Structure of Ultrathin Fe Films on W(110)", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-18
162. T. Ślęzak, M. Ślęzak, A. Kozioł, K. Matlak, K. Freindl, N. Spiridis, E. Partyka-Jankowska, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki, "Non-collinear Magnetization Structure at the Thickness and Temperature Driven Spin Reorientation Transition in Ultrathin Epitaxial Fe Films on W(110)", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, O-2
163. T. Ślęzak, M. Ślęzak, A. Kozioł-Rachwał, K. Matlak, K. Freindl, N. Spiridis, E. Partyka-Jankowska, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki "Non-collinear Magnetization Structure at the Thickness and Temperature Driven Spin Reorientation Transition in Ultrathin Epitaxial Fe Films on W(110)", Book of Abstracts. Workshop on Novel Trends in Optics and Magnetism of Nanostructures 2011, Augustów, p.47
164. M. Śliwa, R. Grabowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Mizera, D. Mucha, R. Socha "Influence of Polymorphic ZrO₂ Phases and the Silver Electronic State on the Activity of Ag/ZrO₂ Catalysts in the Hydrogenation of CO₂ to Methanol", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.27 [ISBN 978-83-60514-13-9]
165. M. Tataruch, A. Dudzik, A. Salwiński, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Reaktywność i stereoselektywność dehydrogenazy etylobenzenowej w reakcji biosyntezy chiralnych alkoholi drugorzędowych", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.112 [ISBN 978-83-60514-13-9]
166. M. Tataruch, M. Szaleniec, K. Szymańska, A. Dudzik, M. Witko, A. Jarzębski "Kowalencyjna immobilizacja dehydrogenaz etylobenzenowej i fenyloetanolowej na nośnikach krzemionkowych", Materiały Zjazdowe. 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011, p.129 [ISBN 978-83-60988-08-4]
167. M. Tatko, M. Dudek, M. Mosiałek, R. P. Socha, D. Mucha, E. Bielańska, G. Mordarski "Synteza kompozytowego materiału katodowego Sm_{0,5}Sr_{0,5}CoO₃-Ag do stałotlenkowych ogniw paliwowych", Mater. Konf. 15. Sem. 'Kompozyty 2011 - Teoria i Praktyka', Spała 2011

168. R. Tokarz-Sobieraj, P. Niemiec "Properties of Active Centers in Heteropolyacids with Different Central Ions. Cluster DFT Calculations", Materiały Zjazdowe. 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011, p.66 [ISBN 978-83-60988-08-4]
169. R. Tokarz-Sobieraj "Properties of Active Centers in Molybdenum Heteropolyacids and Molybdenum Oxide. Cluster DFT Calculations", Book of Abstracts. 10th Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Toruń 2011, p.45
170. R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Wpływ jonu centralnego na charakter centrów aktywnych w heteropolikwasach molibdenowych i wolframowych. Obliczenia klasterowe DFT", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011, p.118 [ISBN 978-83-60514-13-9]
171. J. Waga, J. Zientarski, A. Skoczowski, M. Szaleniec "Efektywność wykorzystania kolumn chromatograficznych typu Poroshell w badaniach białek gliadynowych metodą RP-HPLC", Materiały Konf. Nauka dla Hodowli i Nasiennictwa Roślin Uprawnych, Zakopane 2011, p.132
172. P. Warszyński, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska-Sojka, M. Elźbieciak, K. Szczepanowicz, J. Piekoszewska, A. Trybała, A. Pajor "Functional Nanostructures Formed by Multilayer Films: Properties and Applications", Streszczenia. 5. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO 2011, Politechnika Gdańska, Gdańsk 2011, p.49
173. P. Warszyński, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska-Sojka, K. Szczepanowicz, M. Elźbieciak-Wodka, J. Piekoszewska, A. Trybała, A. Pajor, D. Wodka "Functional Nanostructures Formed by Multilayer Films - Properties and Applications", Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011, p.59
174. T. P. Warzocha, T. Pańczyk "The Nanocapsule: Drug Delivery System Composed of Carbon Nanotube and Magnetic Nanoparticles. Monte Carlo Studies", Abstract. Annual World Conf. on Carbon 'Carbon 2011', Shanghai 2011
175. D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, K. Matlak, B. Strzelczyk, B. Figarska, J. Korecki "Ultrathin FeO and Fe₃O₄ Oxides on Pt(111)", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-17
176. D. Wilgocka-Ślęzak, T. Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, M. Zając, M. Ślęzak, K. Matlak, J. Korecki "The Magnetic Anisotropy of Fe/Au(001) Ultrathin Films in a Function of Fe Thickness and Thickness Driven Polar Spin Reorientation Transition", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-15
177. D. Wilgocka-Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki "Nanoscale Spectro-Microscopy For Krakow Synchrotron", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, P-19
178. M. Wyrwał, B. Jachimska, J. Bednar, M. Kępczyński, M. Nowakowska "Stabilization of Liposomes by Modified Poly(allylamine hydrochloride)", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IKiFP PAN, Krakow 2011, p.355 [ISBN 978-83-62139-23-1]

179. M. Zając, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, M. Ślęzak, T. Ślęzak, J. Korecki "Dynamic Properties of Ultrathin FeO on Pt(111) Studied with Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", Book of Abstracts. TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011, O-19
180. M. Zając, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, J. Korecki "Magnetic Properties of Ultrathin FeO on Pt(111) Studied with Nuclear Techniques", Book of Abstracts. Workshop on Novel Trends in Optics and Magnetism of Nanostructures, Augustów 2011, p.37
181. M. Zaucha "Characterization of Colloid Particles Bilayers on Mica by the Streaming Potential Study", Book of Abstracts. 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
182. M. Zaucha, Z. Adamczyk "Characterization of Colloid Particles Mono- and Bilayers by the Streaming Potential Study", Book of Abstracts. 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, IkiFP PAN, Krakow 2011, p.357 [ISBN 978-83-62139-23-1]
183. J. Zawała, S. Dorbolo, D. Terwagne, N. Vandewalle, K. Małyś "Influence of Size of the Liquid Film Formed on the Bubble Bouncing and Coalescence at Liquid/Air Interface", Book of Abstracts. 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011, p.343
184. M. Zimowska, R. Dula, R. P. Socha, J. Gurgul, B. Napruszewska, J. Plona, E. M. Serwicka "Nanostructure of Hydrotalcite-derived Quasi-amorphous Mixed Oxide Catalyst for VOCs Combustion", Book of Abstracts. 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011, SO21
185. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, R. Dula, D. Mucha, E. M. Serwicka "Kinetyka rekonstrukcji struktury hydrotalkitów MgAl", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.151 [ISBN 978-83-60514-13-9]
186. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalik-Zym, R. Dula, D. Mucha, E. Bielańska, E. M. Serwicka "Specific Surface Area of Hydrotalcite-derived Mixed CuMnAl (1:2:1) Oxides as a Function of Precursor Phase Composition and Crystallinity", Book of Abstracts. European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011, p.291
187. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalik-Zym, R. Dula, D. Mucha, E. M. Serwicka "Kinetyka rekonstrukcji struktury hydrotalkitów ZnAl", Book of Abstracts. 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011, p.150 [ISBN 978-83-60514-13-9]
188. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, D. Mucha, A. Michalik-Zym, R. Dula, E. M. Serwicka "Kinetics of Hydrotalcite Structure Recovery from Calcined Zn-Al Precursors", Book of Abstracts. European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011, p.292

INNE OPRACOWANIA

1. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, redakcja norm Europejskiego Komitetu Normalizacyjnego CEN, Komitet Techniczny 346 CEN "Konserwacja Dziedzictwa Kultury", Grupa Robocza 4 "Środowisko": European Standard EN 15759: 2011 "Conservation of Cultural Property - Indoor Climate - Part 1: Guidelines for Heating Churches, Chapels and Other Places of Worship"
2. A. Drelinkiewicz "Amylterahydroanthraquinone Formation with Palladium-polyaniline-silica Catalyst-hydrogen Peroxide Amylanthraquinone Process, Study of Working Solution Chemistry in Deep Hydrogenation Conditions" Solvay Research and Technology, Brussels

Opracowania Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ:

Nowe wydanie Księgi Jakości, wyd. 4, 12.01.2011 (J. Kryściak-Czerwenka)

Nowe wydania Procedur Ogólnych laboratorium CezaŚ (J. Kryściak-Czerwenka):

- PO-01 „Zarządzanie dokumentami i zapisami”, wyd. 3, 12.01.2011
- PO-02 „Personel i szkolenia”, wyd. 3, 12.01.2011
- PO-03 „Postępowanie z przyrządami pomiarowymi”, wyd. 3, 12.01.2011
- PO-04 „Pobieranie próbek i przyjmowanie próbek do badań”, wyd. 2, 12.01.2011
- PO-05 „Postępowanie z próbkami do badań”, wyd. 3, 12.01.2011
- PO-06 „Postępowanie z materiałami pomocniczymi”, wyd. 3, 12.01.2011
- PO-07 „Oferty, zlecenia, i współpraca ze zleciodawcą”, wyd. 5, 12.01.2011
- PO-08 „Działania korygujące i zapobiegawcze”, wyd. 4, 12.01.2011
- PO-09 „Audyty wewnętrzne”, wyd. 4, 12.01.2011
- PO-10 „Walidacja i szacowanie niepewności”, wyd. 2, 12.01.2011
- PO-11 „Przegląd i doskonalenie systemu zarządzania”, wyd. 2, 12.01.2011
- PO-12 „Zapewnienie spójności pomiarowej i jakości badań”, wyd. 2, 12.01.2011

Nowe wydania Procedur Badawczych (J. Janas i J. Kryściak-Czerwenka)

- PB-01 „Pomiary własności fizykochemicznych oraz składu nieenergetycznych gazów odlotowych za pomocą urządzenia TESTO 350M/XL”, wyd. 3, 12.01.2011
- PB-02 „Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą chromatografii gazowej z detekcją fotojonizacyjną w warunkach in-situ za pomocą chromatografu gazowego Voyager”, wyd. 4, 12.01.2011
- PB-03 „Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą chromatografii gazowej z detekcją fotojonizacyjną w warunkach in-situ za pomocą chromatografu gazowego Voyager”, wyd. 3, 12.01.2011
- PB-04 „Oznaczanie zawartości par substancji organicznych w mieszaninie metodą FT-IR w warunkach in-situ za pomocą analizatora Gasmel DX-4000”, wyd. 3, 12.01.2011

Nowe wydania Instrukcji działania i pozostałych dokumentów laboratorium CezaŚ w związku ze zmianą nazwy Instytutu.

Ekspertyzy

1. J. Janas, J. Kryściak-Czerwenka, J. Opalińska-Piskorz "Funkcjonowanie instalacji LZO w Zakładach Stomil Sp z o.o. w Nekli", Zakłady Stomil Sp z o.o. w Nekli (CezaŚ)
2. L. Krzemień, M. Łukomski "Analiza stanu zachowania XV w. ikony Matka Boska z Dzieciątkiem" Akademia Sztuk Pięknych w Krakowie

3. M. Łukomski, L. Krzenień "Analiza stanu zachowania polichromii i ocena skuteczności zastosowanych działań konserwatorskich etap II", Firma 'Monument service - Marcin Kosarzewski' (w ramach projektu "Ratunkowe prace konserwatorskie krużganków Zamku Lidzbarskiego" realizowanego dzięki wsparciu udzielonemu przez Islandię, Liechtenstein i Norwegię poprzez dofinansowanie ze środków Mechanizmu Finansowego Europejskiego Obszaru Gospodarczego)
4. A. Pacuła, ekspertyza dla Prokuratury Rejonowej w Oświęcimiu
5. E. M. Serwicka-Bahranowska, T. Machej, "Badania właściwości fizykochemicznych i katalitycznych katalizatorów do hydroizomeryzacji ON (reakcja dewaxingu)", PKN Orlen SA
6. E. M. Serwicka-Bahranowska, T. Machej, "Opinia o dodatku do paliw REDUXCO sformułowana na podstawie analizy ekspertyz przedstawionych przez firmę P.W. Prima Sp. z o.o.", P.W. Prima Sp z o.o.

ARTYKUŁY W DRUKU

1. Z. Adamczyk, A. Bratek-Skicki, P. Dąbrowska, M. Nattich-Rak "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Latex Particles Determined by Zeta Potential and AFM Measurements", *Langmuir*, DOI: 10.1021/la2038119 (in press)
2. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Ruszel, R. Grabowski, L. Kępiński, M. A. Małecka "Au/MCr₂O₄ (M=Co, Mn, Fe) Catalysts in the Oxidations of CO, C₂ and C₃ Hydrocarbons" *React. Kinet. Mech. Catal.*, (in press)
3. D. Kosior, J. Zawała, M. Krasowska, K. Małyś "Kinetics of Bubble Collision and Attachment to Hydrophobic Solids: II. Influence of Surface Active Substances", *Intern. J. Mineral Process.* (submitted)
4. J. Mizera, N. Spiridis, R. Socha, R. Grabowski, K. Samson, J. Korecki, B. Grzybowska, J. Gurgul, L. Kępiński, M. A. Małecka "Au/FeO_x Catalysts of Different Degree of Iron Oxide Reduction", *Catal. Today* (in press)
5. M. Morga, Z. Adamczyk, K. Jaszczółt, M. Nattich-Rak, G. Para "Colloid Zirconia Binder of Improved Wetting Properties", *Ceramics Silicates* (in press)
6. A. Niecikowska, M. Krasowska, J. Ralston, K. Małyś "Role of Surface Charge and Hydrophobicity in the Three Phase Contact Formation and Wetting Film Stability under Dynamic Conditions", *J. Phys Chem. C*, (accepted)
7. M. Nosek, P. Weroński, P. Nowak, J. Barbasz "Voltammetric Studies of Colloidal Particle Monolayer on a Gold Rotating Disk Electrode", *Colloids and Surfaces A*, (accepted)
8. W. Płaziński, W. Płazińska "Equilibrium and Kinetic Modeling of Adsorption at Solid/Solution Interfaces", in: "Application of Adsorbents for Water Pollution Control" (A. Bhatnagar, Ed.), Bentham Science, eISBN: 978-1-60805-269-1 (in press)

9. W. Płaziński, W. Rudziński "Molecular Modeling of Ca^{2+} -oligo(α -L-guluronate) Complexes. Toward the Understanding of the Junction Zone Structure in Calcium Alginate Gels", Structural Chem., (in press)
10. R. Rachwalik, M. Hunger, B. Sulikowski "Transformations of Monoterpene Hydrocarbons on Ferrierite-type Zeolites" (submitted)
11. K. Stawicka, I. Sobczak, M. Trejda, B. Sulikowski, M. Ziólek "Organosilanes Affecting the Structure and Formation of Mesoporous Cellular Foams" (submitted)

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. "Book of Abstracts. XXIst International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society (BES)" (B. Jachimska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Ciejka, Eds.), Attyka & IkiFP PAN, Krakow 2011, pp.427 [ISBN 978-83-62139-23-1]
2. "XLIII Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne - XLIII Polish Annual Conference on Catalysis. 16-18.03.2011, Kraków" (D. Rutkowska-Żbik, B. Sulikowski, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2011, pp.170 [ISBN 978-83-60514-13-9]
3. "HITY 2011. Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych. Kraków, 18-20.05.2011" (R. Gryboś, Ed.), IkiFP PAN, Kraków 2011, pp.59 [ISBN 978-83-60514-14-9]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY OTRZYMANE

1. L. Matachowski, D. Mucha, R. Rachwalik, R. Janik "Sposób wytwarzania mikroporowatego katalizatora opartego na heteropolizwiązkach", Patent RP, PL381976 (2011)

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z. Adamczyk "Elektrokinetic Studies of Colloid and Protein Adsorption on Solid/electrolyte Interfaces", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
2. A. Bielański "Chemia wśród innych nauk", 1. Ogólnopolskie Forum Młodych Chemików, Kraków 2011
3. Ł. Bratasz "Impact of Climate Change on Wood and Organic Materials", Int. Workshop for Preventive Conservation of Architectural Heritage, Tainan 2011
4. M. Derewiński "Hierarchical Porous Materials - from Basic Research to Applications", 6th Russian Zeolite Conf. 'Zeolites and Mesoporous Materials: Achievements and Perspectives', Zvenigorod 2011
5. M. Derewiński "Advanced Environmental Applications Using Porous Materials, Including 'Clean Water'", ENMIX/EMH Workshop 'Novel Materials for Future Energy Supply and a Clean Environment', Vatnahalsen 2011
6. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "QM:MM Study of the Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase", Conf. Materials. Biological Transformation of Hydrocarbons - DFG Priority Programme 1319 Meeting, Herrsching/Ammersee 2011
7. R. Tokarz-Sobieraj, P. Niemiec "Properties of Active Centers in Heteropolyacids with Different Central Ions. Cluster DFT Calculations", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011
8. P. Warszyński, W. Lason "Zastosowanie nanotechnologii w neurofarmakologii", 28. Zimowa Szkoła Instytutu Farmakologii PAN, Kraków 2011
9. P. Warszyński "Multifunctional Nanoparticles for Nanomedicine", EURONANOFORUM 2011, Budapest 2011
10. P. Warszyński "COST Action CM1101 - Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
11. P. Warszyński, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolańska-Sojka, K. Szczepanowicz, M. Elżbieciak-Wodka, J. Piekoszewska, A. Trybała, A. Pajor, D. Wodka "Functional Nanostructures Formed by Multilayer Films - Properties and Applications", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
12. M. Witko "Kobiety we współczesnej nauce", Konf. "Nauka jest kobietą", Targi EuroLab 2011, Warszawa 2011
13. M. Witko "Kobiety w nauce na przestrzeni dziejów", Konf. "Chemia w rozwoju i postępie cywilizacji", Senat Rzeczypospolitej Polskiej, Warszawa 2011

14. M. Witko "The World of a Catalyst", 27th Int. Conf. Neutron Scattering Spectroscopy and Related Problems, Zakopane 2011
15. M. Witko "Catalytic Activity of Vanadium and Molybdenum Oxides- Theoretical Studies", Marie Skłodowska-Curie Symp. on the Foundation of Physical Chemistry, Copernicus Centre, Warszawa 2011

REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z. Adamczyk "Mechanism of Colloid and Protein Adsorption. Facts and Myths", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
2. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Determining Mechanism of Fibrinogen Adsorption on Mica via AFM, Streaming Potential and Colloid Enhancement Measurements", Workshop of COST Action D43 Functionalized Materials and Interfaces, Madrid 2011
3. P. Batys, P. Weroński "Charakterystyka struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek kulistych", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
4. P. Batys, P. Weroński "Structure and Transport Properties of Colloidal Multilayers", 1st Scientific Workshop of the Interdisciplinary PhD Studies, Zakopane 2011
5. T. Borowski, A. Wójcik, A. Miłaczewska, M. Radoń "Oxoferryl Species in Mononuclear Nonheme Iron Enzymes: Biosynthesis, Properties and Reactivity from Theoretical Perspective", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
6. T. Borowski, A. Wójcik, A. Miłaczewska, M. Radoń " Oxoferryl Species in Mononuclear Nonheme Iron Enzymes: Biosynthesis, Properties and Reactivity from Theoretical Perspective", 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conference - QBIC 2011, Cesky Krumlov, Czechy, 2011
7. Ł. Bratasz, J. Czop, R. Kozłowski, M. Łukomski "Zarządzanie mikroklimatem w obiekcie zabytkowym: zielone muzeum /otwarty scenariusz", Konf. 'Muzeum a zabytek. Konflikt czy harmonia?', Kraków 2011
8. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, Ł. Lasyk, M. Łukomski, B. Rachwał "Allowable Microclimatic Variations for Painted Wood: Numerical Modelling and Direct Tracing of the Fatigue Damage", 16th Triennial Conf. ICOM Committee for Conservation, Lisbon 2011
9. Ł. Bratasz, B. Rachwał, Ł. Lasyk, M. Łukomski, R. Kozłowski, "Analysis of Fatigue Process in Painted Wood", 177th Symp. on Sustainable Humanosphere, Kyoto 2011
10. Ł. Bratasz, A. Sadłowska-Sałęga, K. Waś, J. Radoń "Symulacje zużycia energii dla różnych scenariuszy kontroli mikroklimatu", EnviControl Final Workshop, Kraków 2011
11. Ł. Bratasz, M. Strojecki, A. Klisińska-Kopacz, M. Łukomski "AE and Works of Art", World Conf. on Acoustic Emission, Beijing 2011

12. Ł. Bratasz, M. Strojceki, M. Łukomski "Acoustic Emission for Tracing Damage Directly in Works of Art", 39th Conf. of American Institute of Conservation, Philadelphia 2011
13. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka "Nowe spojrzenie na adsorpcję i aktywację substratu przez centra kationowe w zeolitach: perspektywa ETS-NOCV", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
14. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj J. Datka "Charge Transfer in Substrate Binding and Activation by Cationic Sites in Zeolites: ETS-NOCV Perspective", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
15. E. Broclawik, M. Radoń, P. Kozyra, M. Mitoraj, J. Datka "Charge Transfer versus Substrate Binding and Activation by Cationic Sites in Zeolites: ETS-NOCV Perspective", 4th Int. Symp. Methods and Applications of Computational Chemistry, Lviv Kharkiv 2011
16. M. Derewiński, P. Sarv "Is Modification of HZSM-5 Zeolite with Phosphorous Irreversible?", 4th Int. Symp. 'Advanced Micro- and Mesoporous Materials', Riviera resort 2011
17. M. Długosz, D. Drozd, M. Szaleniec, K. Szczubiałka, M. Nowakowska "Photodegradation of Selected Water Pollutants Using Hybrid Photocatalysts", Konf. Polymers on the Odra River, Opole 2011
18. A. Dobija, M. Grzesiak "Badania dyfrakcyjne i mikro-dyfrakcyjne nowych materiałów i wybranych obiektów", PAN analytical XRD Users Meeting Sem., Ustroń 2011
19. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik "Manganese Porphyrins as Versatile Catalysts for Hydrocarbon Oxidation", 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011
20. A. Dudzik, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Dehydrogenaza (S)-1-fenyletanolowa - stereospecyficzna redukcja ketonów do alkoholi", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
21. J. Dziejic, K. Szczepanowicz, P. Nowak, P. Warszzyński "Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany utleniaczami", 1. Symp. 'Postępy w badaniach i zastosowaniach fotokatalizatorów na bazie ditlenku tytanu (TiO₂-Szczecin 2011)', Szczecin 2011
22. J. Dziejic, K. Szczepanowicz, D. Wodka, P. Nowak, P. Warszzyński "The Effect of Chemical Oxidants Released from Capsules in the Photodegradation Process of the Humic Substances", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
23. A. Dziejicka, B. Sulikowski "Physicochemical Properties of Natural Clinoptilolite", 18th Zeolite Forum Małe Ciche 2011
24. K. Dzierżęga, M. Lukomski "Pomiar odkształceń obiektów tekstylnych i podobrazii zachodzących w trakcie ich ekspozycji i transportu", FIBER Final Int. Workshop, Kraków 2011

25. R. Gryboś "Reakcje małych cząsteczek na palladzie osadzonym w mordenicie", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011
26. J. Janas, J. Gurgul, R. P. Socha, T. Shishido, M. Che, S. Dźwigaj "Selective Catalytic Reduction of NO by Ethanol on FeSiBEA Zeolite: Influence of the State of Fe on the Catalytic Properties", 22nd North American Catalysis Society Meeting, Detroit 2011
27. J. Janas, W. Rojek, S. Dźwigaj "Effect of C₁ and C₂ Organic Reducing Agents on Selective Catalytic Reduction of NO on FeSiBEA and CoSiBEA Zeolites", Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011
28. J. Jóźwik, R. Grabowski, Z. Bojar "Catalytic Properties of Thin Ni₃Al Nano- and Microcrystalline in Methanol Decomposition", Annual Int. Conf. on Materials, Science, Metal and Manufacturing M3 2011, Global Science and Technology Forum, Singapore 2011
29. J. Korecki "Polar Iron Oxide Films on Pt(111)", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
30. J. Korecki "Are Simple Oxides Useful for Spintronics?", Joint Polish-Japanese Workshop 'Spintronics - from New Materials to Applications', Warszawa 2011
31. D. Kosior, J. Zawała, K. Małyś "When and How α -Terpineol and n-Octanol Can Inhibit the Bubble Attachment to Hydrophobic Surfaces", 16. Międzynarodowa Konf. Przeróbki Kopalni, Wisła 2011
32. A. Koziół-Rachwał, K. Freindl, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Korecki, J. Korecki, "IEC in Epitaxial Fe/MgO/Fe Multilayers", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
33. R. Kozłowski "Standardisation Activity on the Protection of Sensitive Materials Like Textiles within CEN Technical Committee 346", FIBER Final Int. Workshop, Kraków 2011
34. R. Kozłowski, B. Rachwał "Modelowanie komputerowe zagrożeń obiektów drewnianych", EnviControl Final Workshop, Kraków 2011
35. T. Kruk, K. Szczepanowicz, B. Malinowska, M. Kolasińska, P. Warszzyński "Wielowarstwowe cienkie filmy jako powłoki o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych", 54. Zjazd PTChem i SITPChem Lublin 2011
36. M. Krzan, K. Małyś "Influence of Electrolyte on Velocity of the Bubbles Rising in Solutions of Sodium n-Alkylsulfates (C₈, C₁₀, C₁₂)", 16. Międzynarodowa Konf. Przeróbki Kopalni, Wisła 2011
37. K. Kubiak, Z. Adamczyk, M. Oćwieja "Stability of Silver Nanoparticle Monolayers", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
38. M. Łukomski "Web-based Toolbox of Smart Monitoring Techniques", European Workshop on Cultural Heritage Preservation EWCHP-2011, Berlin 2011
39. M. Łukomski "Optymalizacja kontroli klimatu w MNK", EnviControl Final Workshop, Kraków 2011

40. M. Łukomski, Ł. Bratasz, M. Strojceki "Understanding the Response of Painted Wood to the Environmental Impacts - a Path to Rational Strategies for the Collection Care", 177th Symp. on Sustainable Humanosphere, Kyoto 2011
41. M. Łukomski, M. Draniak "Ile kosztuje kontrola klimatu?", EnviControl Final Workshop, Kraków 2011
42. M. Łukomski, B. Rachwał, Ł. Bratasz, R. Kozłowski "*In situ* Monitoring of the Impact of Microclimatic Fluctuations on Polychrome Wood: a Path to Rational Strategy for the Collection Care", Joint Final Conference of COST Actions IE0601 and MP0601, Paris 2011
43. E. Madej, R. P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki "Bimetallic Au-Fe Clusters on TiO₂(110)", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
44. E. Madej, R. P. Socha, N. Spiridis, J. Korecki "CO Adsorption on AuFe and FeAu Bimetallic Clusters Deposited on TiO₂(110)", COST Action D36 Final Workshop 'Structure Performance Relationships in Functional Materials: Catalysis, Electrochemistry and Surfactants', Fuengirola 2011
45. A. Micek-Ilnicka, A. Bielański, B. Gil "Heteropolyacid-MOF Systems as the Novel Catalysts in Ethanol Conversion", 18th Zeolite Forum Małe Ciche 2011
46. J. Mizera, N. Spiridis, R. Socha, R. Grabowski, K. Samson "Katalizatory Au/FeO_x o różnym stopniu utlenienia żelaza w procesie utleniania CO", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
47. J. Mizera, N. Spiridis, R. Socha, R. Grabowski, K. Samson, J. Korecki, B. Grzybowska "AuFeO_x Catalysts with Different Iron Oxidation State in Oxidation of CO", COST Action D36 Final Workshop 'Structure Performance Relationships in Functional Materials: Catalysis, Electrochemistry and Surfactants', Fuengirola 2011
48. E. Młyńczak, J. Gurgul, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, J. Przewoźnik, N. Spiridis, T. Słezak, D. Wilgocka-Słezak, J. Korecki "Structure and Magnetic Properties of Fe-CoO Bilayers" TEAM Workshop, Zakopane 2011
49. M. Morga, Z. Adamczyk, G. Para "The Behavior of Colloid Zirconia and Colloid Silica in the Presence of Fluorine Surfactants, Improvement of Wetting Properties", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
50. M. Mosiałek, G. Mordarski, M. Dudek, R. P. Socha, A. Rapacz-Kmita "Ionic Conductivity in the CeO₂-Gd₂O₃-BaO System", 12th Conf. on Composites and Ceramic Materials - Technology, Application and Testing (E-MRS Conf.), Białowieża 2011
51. M. Najbar, E. Pałkowska, J. Dutkiewicz, I. Nazarczuk, L. Lityńska-Dobrzyńska, E. Bielańska, A. Weselucha-Birczyńska, W. Łasocha, J. Camra, M. Kozicki "Simultaneous NO Reduction and Soot Oxidation on Transition Metal Oxide Catalyst", Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011

52. A. Niecikowska, J. Zawała, K. Małysa "Influence of Adsorption of n-Alkyltrimethylammonium Bromides (C₈, C₁₂, C₁₆) and Bubble Motion on Kinetics of the Bubble Attachment to Mica Surface", 16. Międzynarodowa Konf. Przeróbki Kopalni, Wisła 2011
53. M. Nosek, P. Weroński P. Nowak "Ion Transport through Multilayers of Colloidal Particles", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
54. M. Nosek, P. Weroński "Cyclic Voltammetry Method for Examining Ion Transport through Porous Layer", 1st Scientific Workshop of the Interdisciplinary PhD Studies, Zakopane 2011
55. N. Nosidlak, R. P. Socha, D. Wodka, A. Daniel, J. Nizioł, J. Sanetra "Wpływ nanocząstek na właściwości ogniw fotowoltaicznych zbudowanych na bazie P3OT". 2. Krajowa Konferencja Fotowoltaiki, Krynica-Zdrój 2011
56. P. Nowak, M. Nastawny, I. Kozyra A. Węgrzynowicz "Controlled Adsorption at the Surface of Copper Sulfide Minerals - A Way to Abate the Problem of Environment Contamination by the Copper Sulfide Oxidation Products?" 16. Międzynarodowa Konf. Przeróbki Kopalni, Wisła 2011
57. P. Nowak, R. P. Socha, T. Cieślik "Influence of Adsorption on the Charge Transfer Reactions at the Pyrite Surface. Preliminary Study", 16. Międzynarodowa Konf. Przeróbki Kopalni, Wisła 2011
58. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga "Kinetyka adsorpcji oraz struktura monowarstw nanocząstek srebra na powierzchniach heterogenicznych", 6. Krakowska Konf. Młodych Uczonych, Kraków 2011
59. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Influence of Ionic Strength on Silver Particle Monolayer Structure and Density", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
60. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Silver Nanoparticles Monolayers on Polyelectrolyte Covered Mica Produced by Self-assembly", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
61. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Monowarstwy nanocząstek srebra o kontrolowanej strukturze i stopniu pokrycia otrzymywane w procesach samoorganizacji w warunkach dyfuzyjnych", 5. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO 2011, Gdańsk 2011
62. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Tuning Silver Particle Monolayer Structure and Density via Controlled Adsorption-desorption Processes", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
63. A. Pajor, P. Warszyński, "Electroactive multilayer films of polyelectrolytes and Prussian Blue nanoparticles as a sensitive tool for H₂O₂ detection", 1st Scientific Workshop of the Interdisciplinary PhD Studies, Zakopane 2011
64. T. Pańczyk "Crucial Prerequisites for a Functional Magnetically Triggered Nanocontainer", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011

65. T. Pańczyk, T. P. Warzocha "A Magnetically Controlled Nanocontainer as a Drug Delivery System. Monte Carlo Predictions of Its Properties", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
66. W. Płaziński "The Structure of Calcium Alginate Hydrogels at the Molecular Level. A Computer Simulation Study", 3rd Int. Symp. on Surface and Interface of Biomaterials, Sapporo 2011
67. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Stability of "Wet" and "Dry" PLL/Casein Multilayers", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
68. J. Plona, D. Mucha, R. P. Socha, R. Dula, E. M. Serwicka "Zirconium and Gallium as Modifiers Enhancing Catalytic Activity of Cu/ZnO/Al₂O₃ System in the Synthesis of Methanol", 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011
69. J. Plona, M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalin-Zym, T. Machej, Ł. Mokrzycki, E. M. Serwicka "Rola cyrkonu i galu jako modyfikatorów zwiększających aktywność katalityczną układu Cu/ZnO/Al₂O₃ w syntezie metanolu", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
70. W. Płaziński "Molecular Modeling of Interactions between Alginate Chains and Bivalent Metal Ions: Computational and Thermodynamic Aspects", Symp. on Micro/Nano Aspects of Biomaterials, Kioto 2011
71. W. Płaziński "Calcium Alginates: Structure, Dynamics and Thermodynamics. Insights from the Molecular Modeling Studies", Conf. on Applied Theory on Molecular Systems, Hyderabad 2011
72. W. Płaziński "Modelowanie molekularne. Teoria, a praktyka", Spotkanie Koła Naukowego Chemików *Alkahest*, Wydział Chemii UMCS, Lublin 2011
73. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Oddziaływania białka CD44 z hialuronianem. Symulacje metodą dynamiki molekularnej", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
74. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Interactions between CD44 Protein and Hyaluronan: Insights from the Molecular Modeling Study", 4. Konwersatorium Chemii Medycznej. Lublin 2011
75. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Zastosowanie pakietu oprogramowania *Gromacs* do symulacji metodami dynamiki molekularnej", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011
76. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, W. Łasocha "XRPD Studies of the Objects of Cultural Heritage of Copper and Its Alloys". 22nd Congr. & General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid 2011
77. W. Rudziński "Fundamentals of the Theoretical Description of Adsorption Kinetics Based on the Statistical Rate Theory", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011

78. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, A. Kania "How Do Chelating Ligands Influence Coordination Properties of Mg^{2+} ?" Conf. Modeling Interactions in Biomolecules V, Kutna Hora 2011
79. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, A. Kania "Coordinative Properties of Chlorophylls: DFT Studies", 10th Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Toruń 2011
80. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "DFT Studies on Catalytic Activity of Manganese Porphyrins", 15th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Berlin 2011
81. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "Manganese Porphyrins as Versatile Oxidation Catalysts - DFT Studies", 10th Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Toruń 2011
82. R. Socha, M. Lipiński, K. Hejduk "Charakteryzacja metodą XPS warstw azotku krzemu dla ogniw słonecznych", 2. Krajowa Konferencja Fotowoltaiki, Krynica-Zdrój 2011
83. R. P. Socha, E. Madej, N. Spiridis, J. Korecki "Electronic State of Au Adsorbed on Defected MgO(100) Surfaces", COST Action D36 Final Workshop 'Structure Performance Relationships in Functional Materials: Catalysis, Electrochemistry and Surfactants', Fuengirola 2011
84. M. Strojcki "Bezpieczeństwo obiektów w trakcie zmiany sposobu zarządzania mikroklimatem", EnviControl Final Workshop, Kraków 2011
85. M. Strojcki, Ł. Bratasz, M. Łukomski "Acoustic Emission for Tracing Damage in Wooden Artworks", World Conf. on Acoustic Emission, Beijing 2011
86. M. Strojcki, C. Colla, M. Łukomski, E. Gabrielli, Ł. Bratasz "The Kaiser Effect in Wood - Does Historic Wood Have Stress Memory?", European Workshop on Cultural Heritage Preservation EWCHP-2011, Berlin 2011
87. M. Strojcki, M. Łukomski, C. Colla, E. Gabrielli "Acoustic Emission as a Non-destructive Method for Tracing Damage: from Laboratory Testing to Monitoring Historic Structures", Int. Symp. on Nondestructive Testing of Materials and Structures NDTMS-2011, Istambul 2011
88. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "The Influence of the Protein Environment on the Oxidation of Ethylbenzene by Ethylbenzene Dehydrogenase - a QM:MM Study", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
89. T. Ślęzak, M. Ślęzak, A. Kozioł, K. Matlak, K. Freindl, N. Spiridis, E. Partyka-Jankowska, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki, "Non-collinear Magnetization Structure at the Thickness and Temperature Driven Spin Reorientation Transition in Ultrathin Epitaxial Fe Films on W(110)", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
90. M. Śliwa, R. Grabowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Mizera, D. Mucha, R. Socha "Influence of Polymorphic ZrO₂ Phases and the Silver Electronic State on the Activity of Ag/ZrO₂ Catalysts in the Hydrogenation of CO₂ to Methanol", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011

91. M. Tataruch, M. Szaleniec, K. Szymańska, A. Dudzik, M. Witko, A. Jarzębski "Kowalencyjna immobilizacja dehydrogenaz etylobenzenowej i fenyloetanolowej na nośnikach krzemionkowych", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011
92. M. Tatko, M. Dudek, M. Mosiałek, R. P. Socha, D. Mucha, E. Bielańska, G. Mordarski "Synteza kompozytowego materiału katodowego $\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3\text{-Ag}$ do stałotlenkowych ogniw paliwowych", 15. Sem. 'Kompozyty 2011 - Teoria i Praktyka', Spała 2011
93. P. Warszyński, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska-Sojka, M. Elźbieciak, K. Szczepanowicz, J. Piekoszewska, A. Trybała, A. Pajor "Functional Nanostructures Formed by Multilayer Films: Properties and Applications", 5. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO 2011, Politechnika Gdańska, Gdańsk 2011
94. T. P. Warzocha, T. Pańczyk "The Nanocapsule: Drug Delivery System Composed of Carbon Nanotube and Magnetic Nanoparticles. Monte Carlo Studies", Annual World Conf. on Carbon 'Carbon 2011', Shanghai 2011
95. D. Wilk, Ł. Bratasz "Spękania w zabytkowych zaprawach romańskich - wyjaśnienie mechanizmu ich powstawania za pomocą metod fizykochemicznych", 11. Konf. Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego 'Analiza chemiczna w ochronie zabytków', Warszawa 2011
96. M. Zaucha "Characterization of Colloid Particles Bilayers on Mica by the Streaming Potential Study", 6. Szkoła Letnia dla Doktorantów Zjawiska Międzyfazowe w Teorii i Praktyce, Sudomie 2011
97. M. Zając, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, A. Kozioł-Rachwał, M. Ślęzak, T. Ślęzak, J. Korecki "Dynamic Properties of Ultrathin FeO on Pt(111) Studied with Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
98. M. Zimowska, R. Dula, R. P. Socha, J. Gurgul, B. Napruszewska, J. Plona, E. M. Serwicka "Nanostructure of Hydrotalcite-derived Quasi-amorphous Mixed Oxide Catalyst for VOCs Combustion", 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011
99. M. Zimowska, H. Pálková, J. Madejová, E. Bielańska, L. Lityńska-Dobrzyńska, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka "Various Aspects of Synthesis and Properties of the Laponite-derived Porous Clay Heterostructures", 18th Zeolite Forum Małe Ciche 2011

POSTERY

1. M. Adamczak, H. J. Hoel, G. Gaudernack, J. Barbasz, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Capsules with Quantum Dots for Biomedical Applications", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011, [ISBN 978-83-62139-23-1]
2. Z. Adamczyk, M. Nattich-Rak, M. Sadowska, M. Wasilewska "Fibrinogen Monolayers on Mica Studied via the Streaming Potential and Colloid Deposition Methods, 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011

3. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Colloid Enhancement of Protein Layers: Fibrinogen on Mica, 5. Krajowa Konf. Nanotechnologii NANO 2011, Gdańsk 2011
4. Z. Adamczyk, M. Nattich, M. Wasilewska, M. Sadowska "Colloid Enhancement of Protein Layers: Fibrinogen on Mica", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
5. K. Bahranowski, A. Michalik-Zym, M. Zimowska, E. M. Serwicka, Z. Olejniczak, L. Lityńska, M. Bazarnik "Synthesis, Physico-chemical Characterization and Catalytic Properties of Aluminated Mesoporous Silicas of FSM-16 Type", European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011
6. J. Barbasz, M. Cieśla, A. Michna „The Simultaneous Adsorption Two Types of Latex Particles. Comparison of Theory with Experiment", 24th Marian Smoluchowski Symp. of Statistical Physics, Zakopane 2011
7. U. Bazylińska, R. Skrzela, K. Szczepanowicz, p. Warszyński "Influence of Polyelectrolyte-type upon *in vitro* Release Profiles of Multilayeroil-cored Nanocapsules", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
8. P. Bezdicka, S. Svarcova, Z. Petrova, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, D. Hradil "Difficulties in Identification of Copper Based Pigments in Objects of Art", 22nd Congr. & General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid 2011
9. E. Bielańska, M. Zimowska, I. Nazarczuk, M. Kozicki, M. Najbar "SEM-EDS Studies of Transition Metal Catalysts for NO Decomposition", Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011
10. A. Bratek-Skicki, Z. Adamczyk, P. Dąbrowska, M. Nattich-Rak "Electrokinetic Studies of Fibrinogen Adsorption on Latex Particles" Conf. on Polymers for Advanced Technologies, Łódź 2011
11. E. Broclawik, J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj J. Datka "New Insights into Substrate Binding and Activation by Cationic Sites in Zeolites: ETS-NOCV Perspective", 5th Int. FEZA Conf., Valencia 2011
12. M. Derewiński "Effect of Washing on Properties of Phosphorous Modified HZSM-5 Zeolite", 5th Int. FEZA Conf., Valencia 2011
13. M. Derewiński, J. Podobiński, P. Sarv "Odwracalna modyfikacja zeolitu typu MFI kwasem ortofosforowym", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011]
14. A. Dobija, W. Nitek, W. Łasocha "Kompleksy peroksomolibdenianowe z kwasem nikotynowym – badania strukturalne i właściwości fizykochemiczne", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011
15. A. Dobija, W. Nitek, W. Łasocha "Struktura i właściwości fizykochemiczne $\text{MoO}_3[\text{C}_6\text{H}_4(\text{NH}_2)_2]$ ", 53. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2011

16. A. Dobija, W. Nitek, W. Łasocha "Structural Studies and Physicochemical Properties of New Molybdenum Peroxocomplexes with Nicotinic Acid", Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011
17. A. Dobija, W. Nitek, D. Mucha, W. Łasocha "Molybdenum Peroxocomplexes as a Promising Catalyst", 22nd Congr. & General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid 2011
18. D. Drozd, M. Długosz, D. Bielska, M. Kumorek, M. Kopec, A. Karewicz, K. Szczubińska, M. Nowakowska, M. Szaleniec "Polimerowe i hybrydowe katalizatory do oczyszczania wody", 4. Konf. Naukowo-Techniczna 'Ochrona Środowiska, Woda i Ścieki w Przemysle Spożywcym', Pułtusk 2011
19. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik "Manganese Porphyrins as Versatile Catalysts for Hydrocarbon Oxidation", 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conference on Catalysis, Bertinoro, Włochy, 2011
20. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Aktywne formy porfiryny manganu – katalizatora w reakcjach utleniania", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
21. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Hydrogen Peroxide as Oxidant in Biomimetic Catalysis by Porphyrins", 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conf., Cesky Krumlov 2011
22. M. Dudek, M. Mosiałek, A. Rapacz-Kmita, G. Mordarski "Ceramic Proton Conductors Based on $Ba_{0.95}M_{0.05}Zr_{0.9}Y_{0.1}O_3$, M=Ca, Mg; Preparation, Properties and Application in Fuel Cells", 3rd Polish Forum on Fuel Cells and Hydrogen Technologies 'Smart Materials for Hydrogen and Renewable Energy', Warszawa 2011
23. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Drelinkiewicz, E. Bielańska, R. Socha, L. Lityńska-Dobrzyńska "Preparation, Characterization and Catalytic Application of Ru Catalysts Supported on Amine Groups Functionalized Polymer, 2nd Int. Conf. on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Strasbourg 2011
24. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Drelinkiewicz, M. Zimowska, R. Socha, Z. Olejniczak "Osadzanie fosfinowego kompleksu Ru(II) na mezoporowatej krzemionce typu FSM-16. Charakterystyka fizykochemiczna i badania katalityczne w reakcji uwodornienia fenylacetylenu", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
25. A. Dudzik, K. Szymańska, A. B. Jarzębski, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "(S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase - Stereospecific Reduction of Ketones to Alcohols", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
26. A. Dudzik, K. Szymańska, A. Jarzębski, M. Tataruch, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "Biocatalytic Ketone Reduction - Production of Chiral Alcohols with (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011

27. A. Dudzik, K. Szymańska, A. B. Jarzębski, M. Tataruch, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider, "Biocatalytic Ketone Reduction - Production of Chiral Alcohols with (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", 2nd Congr. of Biochemistry and Cell Biology, Krakow 2011
28. A. Dudzik, M. Tataruch, K. Szymańska, A. B. Jarzębski, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Ethylbenzene Dehydrogenase - Biocatalytic Synthesis of Secondary (S)-Alcohols", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
29. K. Freindl, M. Zając, T. Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, K. Matlak, E. Madej, E. Partyka-Jankowska, J. Korecki, "Comparison of Oxygen Adsorption on Fe(110) Surface and Fe(110)/W(110) Monolayer", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
30. T. Gieła, K. Freindl, N. Spiridis, J. Korecki "Au Films on W(110): Reconstruction and Dislocations", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
31. B. Gil, B. Marszałek, A. Micek-Ilnicka, Z. Olejniczak "Wpływ Si/Al na dystrybucję atomów Al w zeolitach MWW", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
32. A. J. Groszek, E. Lalik "Abnormally High Heat Evolutions Generated by the Interaction of Oxygen with Hydrogen Chemisorbed on Gold", Faraday Discussions 152 'Gold', Cardiff 2011
33. R. Gryboś, J. Handzlik "Periodyczne obliczenia DFT dla pełnej komórki ZSM-5", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
34. R. Gryboś "Symulacje DFT mechanizmu NO-SCR w mordenicie dotowanym palladem" 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011
35. R. Gryboś, M. Witko "NO, CO and CH₄ Adsorption on Isolated Pd Clusters and Embedded in Mordenite. Quantum-chemical DFT Study", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
36. M. Grzesiak, W. Łasocha "Synteza i właściwości fizykochemiczne wybranych soli kwasów dikarboksylowych", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011
37. M. Grzesiak, W. Łasocha "Badania strukturalne soli baru z wybranymi kwasami dikarboksyłowymi", 53. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2011
38. M. Grzesiak, W. Nitek, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Investigations of Barium and Strontium Dicarboxylates - 'New Metalorganic Compounds'", 22nd Congr. & General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid 2011
39. J. Gurgul, K. Freindl, A. Kozioł-Rachwał, K. Matlak, J. Przewoźnik, N. Spiridis, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki "Exchange-bias in Epitaxial CoO/Fe Bilayer Grown on MgO(001)", TEAM Workshop, Zakopane 2011
40. J. Gurgul, L. Matachowski, R. P. Socha, M. Zimowska "Wpływ składu powierzchni soli Ag₃PW₁₂O₄₀ i Ag₃PMo₁₂O₄₀ na ich aktywność katalityczną w reakcji odwodnienia etanolu", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011

41. J. Gurgul, L. Matachowski, R. P. Socha, M. Zimowska "The Influence of Surface Composition of $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ and $\text{Ag}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ Salts on Their Catalytic Activity in Dehydration of Ethanol", 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
42. J. Gurgul, E. Młyńczak, A. Kozioł-Rachwał, K. Matlak, J. Przewoźnik, N. Spiridis, T. Ślęzak, J. Korecki "Interplay between Structure and Magnetic Properties of CoO-Fe Exchange-bias Systems", 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
43. J. Gurgul, E. Młyńczak, N. Spiridis, J. Korecki "Layer-by-layer Epitaxial Growth of Polar FeO(111) Thin Film on MgO(111)", TEAM Workshop, Zakopane 2011
44. J. Gurgul, E. Młyńczak, N. Spiridis, J. Korecki "Layer-by-layer Epitaxial Growth of Polar FeO(111) Thin Film on MgO(111)", 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
45. J. Handzlik, R. Gryboś "Theoretical Studies of Monomeric Cr(VI) Oxide Species on Silica", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
46. J. Hartwich, B. Jachimska, W. Drożdż, Ł. Partyka, R. Wiaderkiewicz "Fasting and Postprandial Triglyceride-rich Lipoprotein Particle Subclass Analysis by Dynamic Light Scattering. The Pilot Study", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
47. B. Jachimska, A. Pajor "Physico-chemical Characterization of BSA (Conformational Stability, Shape and Effective Charge) and Deposition at Mica Surfaces", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
48. B. Jachimska, S. Zapotoczny, "Characteristics and Properties of PAMAM Dendrimers", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
49. B. Jachimska, M. Zembala, S. Zapotoczny, Z. Adamczyk "Combining Streaming Potential and AFM Measurements to Estimate Effective Surface Charge of PAMAM Dendrimers", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
50. E. Jamróz, G. Para, B. Jachimska, A. Para "The Interfacial Properties of Protein/Furcellarane Systems", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
51. E. Jamróz, G. Para, B. Jachimska, A. Para "Kompleksy białek z fulceranem jako elementy budowy nanostruktury", Konf. 'Rola dokonań młodych naukowców a możliwości sukcesu naukowego i zawodowego', Kraków 2011
52. E. Jarek, M. Krzan, A. Pajor, M. Orlof, K. Czapla, L. Szyk-Warszyńska, B. Korchowiec, P. Warszyński "Enzymes as Nanotools - Analysis of the Enzymatic Reaction Occurring in Phospholipid Layers at Liquid/Gas and Liquid/Solid Interfaces", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011

53. E. Jarek, L. Szyk-Warszyńska, D. Dronka-Góra, P. Warszyński "Multilayer Polyelectrolyte Films with Catalytic Activity for Biomedical Application", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
54. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, B. Napruszewska, R. Dula, E. M. Serwicka "Synteza, właściwości fizykochemiczne i katalityczne miedziowych soli heteropolikwasów", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
55. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, P. Nowak, E.M. Serwicka "Porównanie aktywności katalitycznej kompleksów salenowych, porfirynowych i ftalocyjaninowych, zawierających żelazo lub mangan w reakcji utleniania fenolu", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
56. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, M. Szaleniec, E. M. Serwicka "Utlenianie cykloheksenu tlenem molekularnym w obecności heteropolianionów PW12 i PMo12 dotowanych substytucyjnie Co, Mn, Fe", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
57. M. Kolańska-Sojka, S. Wojtyła, P. Warszyński "Electroactive Properties of Prussian Blue Nanoparticles Embedded in Polyelectrolyte Multilayer", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
58. D. Kosior, J. Zawała, K. Małyś, "Role of "Entrapped" Air at the Hydrophobic Solid Surface in Kinetics of the Three Phase Contact Formation", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
59. R. Kosydar, E. Lalik, J. Gurgul, A. Drelinkiewicz "Wpływ promotorów K, Cs, Na, Li na aktywność katalizatora 2 %Pd/Al₂O₃ w reakcji uwodorniania 2-etyloantrachinonu", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
60. B. Kozik, Ż. Ługowska, M. Wyrwał, M. Szaleniec, A. Dudzik, K. Jamroży "Enantioselective Synthesis of Indan- and Tetrahydronaphthalenediol Based on 1-(4-Hydroxyphenyl)ethanol Framework", 3rd Int. Environmental Best Practices Conf. EBP-3, Offenburg 2011
61. A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, K. Freindl, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, J. Korecki "Tunable Magnetic Properties of Fe/MgO superlattice", Joint Polish-Japanese Workshop 'Spintronics - from New Materials to Applications', Warszawa 2011
62. M. Krzan, E. Jarek, A. Chrzanowska, P. Warszyński, K. Małyś "Fast Method for Detection of Water Soluble Surface-active Products of Enzymatic Reaction by Monitoring the Bubble Velocity Variations", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
63. M. Krzan, K. Małyś "Influence of Electrolyte on Velocity of the Bubbles Rising in Solutions of Sodium n-Alkylsulfates (C8, C10, C12)", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
64. L. Krzemień, M. Łukomski "The Response of Growth Ring in Wood to Microclimate Change", COST Action FP0802 Int. Workshop, Vila Real, 2011

65. K. Luberda-Durnaś, M. Łoś, W. Łasocha "Wpływ rodzaju użytej aminy na prawdopodobieństwo powstania hybrydowych organiczno-nieorganicznych związków warstwowych typu $\text{MeX}(\text{amina})_{1/2}$ ", 53. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2011
66. K. Luberda-Durnaś, W. Matejka, W. Łasocha "Simple Methods of Synthesis ZnS Nanoparticles", Conf. 'Nano-Ostrava 2011', Ostrava 2011
67. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, M. Kozieł, W. Nitek "Badania struktur krystalicznych grupy nowych molibdenianów", 53. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2011
68. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, I. Nazarczuk, M. Najbar "XRD Study of Oxide Ni-Fe-Cr Catalyst for NO Decomposition", Int. Symp. on Nitrogen Oxides Emission Abatement NOEA 2011, Zakopane 2011
69. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, W. Nitek, "Crystal Structures of few New β -Octamolybdates", 22nd Congr. & General Assembly of the International Union of Crystallography, Madrid 2011
70. S. Łukasiewicz, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, M. Dziedzicka-Wasylewska "Targeted Delivery System for Therapy of Schizophrenia", 19th Int. Conf. on Bioencapsulation, Bioencapsulation Research Group, Amboise 2011
71. K. Matlak, A. Kozioł-Rachwał, M. Ślęzak, T. Ślęzak, K. Freindl, N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki "Room Temperature Perpendicular Magnetic Anisotropy in eEpitaxial $[\text{Fe}/\text{MgO}]_N$ Multilayers", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
72. A. Micek-Ilnicka, A. Bielański, E. Bielańska "Nanorurki węglowe, jako nośniki heteropolikwasów, katalizujących konwersję alkoholu etylowego", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
73. A. Michalik-Zym, M. Zimowska, B. D. Napruszewska, R. Dula, E. Bielańska, D. Mucha, E. M. Serwicka "Rozwinięcie powierzchni mieszanych tlenków CuMnAl (1:2:1) otrzymanych metodą hydrotalkitową jako funkcja składu fazowego i stopnia krystaliczności prekursora", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011
74. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski "Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase from DFT Calculations", Int. Spring School BES 'Novel Techniques for Nanobiological Sciences', Kraków 2011
75. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski "Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase from DFT Calculations", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
76. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski " Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase from DFT Calculations", 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conf. QBIC 2011, Cesky Krumlov 2011

77. A. Miłaczewska, E. Broclawik, T. Borowski " Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase from DFT Calculations", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
78. E. Młyńczak, P. Luches, A. Rota, S. Valeri, J. Korecki "Magnetic Properties of Fe-NiO Bilayers Grown on MgO(100)", Joint Polish-Japanese Workshop 'Spintronics - from New Materials to Applications', Warszawa 2011
79. M. Morga, G. Para, Z. Adamczyk, A. Karwiński "Modifications of Wetting Properties of Colloid Silica Binders Using Fluorine Surfactants", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
80. M. Mosiałek, M. Dudek, E. Bielańska, R. P. Socha, G. Mordarski, J. Barbasz, A. Rapacz-Kmita "Silver Electromigration During Prolongated Negative Potential in the Ag|8ysz Halfcell, AFM, SEM and XPS Study", 18th Int. Conf. on Solid State Ionics, Warszawa 2011
81. B. D. Napruszewska, R. Dula, M. Zimowska, E. M. Serwicka "Optymalizacja syntezy układów Zn-Al typu hydrotalkitu o wysokiej zawartości cynku", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2011
82. A. Niecikowska, M. Krasowska, J. Ralston, K. Małysa "Role of Surface Charge and Hydrophobicity in Formation of Three Phase Contact at Titania Surface", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
83. A. Niecikowska, J. Zawała, K. Małysa "Influence of Bubble motion in n-Hexadecyltrimethylammonium Bromide on Kinetics of the Bubble Attachment to Mica Surface", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
84. P. Niemiec, R. Tokarz-Sobieraj "Electronic Structure of Tungsten and Molybdenum Heteropolyacids with Different Central Ions. Cluster DFT calculations", 5th IDECAT/ERIC-JCAT Conf. on Catalysis, Bertinoro 2011
85. P. Niemiec, R. Tokarz-Sobieraj "Struktura elektronowa heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych z różnymi jonami centralnymi. Obliczenia klasterowe DFT", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
86. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "High Density Silver Monolayers Produced by Colloid Self-assembling on Polyelectrolyte Supporting Layers", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
87. M. Oćwieja, Z. Adamczyk, M. Morga, A. Michna "Functional Silver Nanoparticle Monolayers Produced by Colloidal Self-assembling-Characteristic and Morphology", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
88. B. Olbromska, A. Koziół-Rachwał, K. Freindl, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Korecki, J. Korecki "Magneo-optic Kerr Effect Imaging of the Magnetization Reversal in Fe/MgO/Fe Trilayers", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011

89. B. Olbromska, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, E. Młyńczak, N. Spiridis, M. Ślęzak, T. Ślęzak, P. Korecki, J. Korecki "Influence of Epitaxial MgO Buffer Layer on Magnetic and Transport Properties of Fe/MgO/Fe Trilayers", European Conf. on Surface Science ECOSS 28, Wrocław 2011
90. K. Onik, J. Podobiński, E. Włoch, M. Derewiński "Wykorzystanie cząstek koloidalnych w syntezie nowych materiałów warstwowych", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
91. Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik, B. Szmyd, T. Szumelda, L. Fiedor, G. Stochel "Mechanistic Studies on Chlorophyll Degradation Processes", 11th Symp. on Applied Bioinorganic Chemistry, Barcelona 2011
92. M. Oszejca, W. Łasocho "Analiza strukturalna β -oktamolobdenianu 4-jodoaniliny ze szczyptą DFT", 53. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2011
93. A. Pacuła, K. Uosaki, K. Ikeda "New Hybrid Materials Containing Cobalt Particles and Nitrogen-doped Nanostructured Carbon Obtained by Catalytic Chemical Vapour Deposition Route", MANA International Symp., Tsukuba 2011
94. A. Pacuła, K. Uosaki "Novel Composites Containing Nitrogen-doped Nanostructures Carbon and Cobalt as Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction", 62nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Niigata 2011
95. A. Pacuła, R. P. Socha, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska "Synthesis, Characterization and Testing of Electroactive Composites Containing Cobalt Species Deposited on N-doped Nanostructured Carbon", 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
96. A. Pajor, M. Kolasińska-Sojka, S. Wojtyła, P. Warszyński "Electroactive Multilayer Films Formed from Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
97. A. Pajor, P. Warszyński "Electroactive Multilayer Films of Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles and Its Application for H₂O₂-sensors", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
98. H. Pálková, Ľ. Jankovič, M. Zimowska, J. Madejová "Dissolution of the Surfactants-modified Montmorillonite in HCl - Stability Studies", European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011
99. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Kielkiewicz, A. B. Hendrich "Calorimetric Study of Interaction of Metalloporphyrins with Lipid Bilayers", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN
100. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Thickness and Stability of PLL/Casein Multilayers Investigated by Ellipsometry and QCM", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011

101. J. Piekoszewska, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Stability of PLL/Casein Multilayer Films in the Aqueous Media with Different pH", 13th European Student Colloid Conf., Falkenberg 2011
102. M. Piotrowski, K. Szczepanowicz, D. Jantas, W. Lasoń, P. Warszyński "Evaluation of Neuroprotective Action of Nanoencapsulated Calpain Inhibitor - MDL 28170", 3rd Int. Conf. NANOCON 2011, Brno 2011
103. M. Piotrowski, K. Szczepanowicz, D. Jantas, W. Lasoń, P. Warszyński "Evaluation of Polyelectrolyte-coated Nanoparticles Biocompatibility Against SH-SY5Y Human Neuroblastoma Cells", 18th Int. Symp. on Microencapsulation, Antalya 2011
104. J. Plona, M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalin-Zym, T. Machej, Ł. Mokrzycki, E.M. Serwicka "Rola cyrkonu i galu jako modyfikatorów zwiększających aktywność katalityczną układu Cu/ZnO/Al₂O₃ w syntezie metanolu", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
105. W. Płaziński "Calcium Alginates: Structure, Dynamics and Thermodynamics. Insights from the Molecular Modeling Studies", Conf. on Applied Theory on Molecular Systems, Hyderabad 2011
106. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Interactions of Hyaluronan with CD44 Protein: A Molecular Dynamics Study", Conf. 'Relationship of Numerical Simulations and Experimental methods', Warszawa 2011
107. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Hyaluronan Binding by CD44: a Preliminary Molecular Dynamics Study", Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej PTChem, Murzasichle 2011
108. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Wykorzystanie dynamiki molekularnej do badania oddziaływań międzycząsteczkowych na przykładzie układu CD44-HA", 54 Zjazd PTChem i SITPChem, Lublin 2011
109. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Wykorzystanie programu VMD do badania oddziaływań układu CD44-hialuronian", Konf. 'Wpływ młodych naukowców na osiągnięcia polskiej nauki', Wrocław 2011
110. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "Dynamika molekularna", 5. Kopernikańskie Seminarium Doktoranckie. Toruń 2011
111. W. Płaziński, W. Rudziński "Molecular and Macroscopic Modeling of Interactions between Alginates and Metal Ions", Conf. 'Understanding Molecular Simulations. MolSim 2011', Amsterdam 2011
112. J. Połtowicz, K. Pamin, B. Jachimska, K. Onik, R. Grabowski "Macrocyclic Complexes on Natural Polysaccharides as Catalysts in Oxidation of Cyclooctane", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011

113. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, J. Kołacz, R. Grabowski "Zależności OCV jednokomorowego ogniwa paliwowego Au/YSZ/Pt od składu równowagowej mieszanki zasilającej ($\text{CH}_4 + \text{O}_2$) z uwzględnieniem wydzielania się węgla", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
114. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, J. Kołacz, R. Grabowski "Dependencies of the Open-circuit Voltage of Au|YSZ|Pt Single-chamber Fuel Cell on the Composition of the Uniform $\text{CH}_4 + \text{O}_2$ Gas Mixture with Solid Carbon Deposition", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
115. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "Badania nad aktywacją węglowodorów przez ligandy aksjalne porfiryn", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
116. D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Formation of Oxocarbides from MoO_3 . DFT Studies", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
117. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "DFT Studies on the Influence of Chelating Agents on the Coordination Properties of Mg^{2+} ", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
118. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "Cyclohexene Oxidation by Manganese Porphyrin – a DFT Study", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
119. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Witko "Manganese Porphyrins as Versatile Oxidation Catalysts - DFT Studies", 10th Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Toruń 2011
120. D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "DFT Description of Geometry and Electronic Properties of Molybdenum (Oxo)carbides", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
121. W. Simka, M. Mosiałek, G. Nawrat, J. Szade, A. Winiarski, J. Żak, A. Maciej "Electropolishing of Ti-13Nb-13Zr Alloy", 21st Conf. on Biomaterials in Medicine and Veterinary, Rytro 2011
122. R. P. Socha, M. Szczepanik, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Synthesis of Epitaxial Layers of Mixed $\text{Fe}_x\text{Mn}_y\text{O}$ Oxides on $\text{MgO}(001)$ ", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
123. R. P. Socha, M. Szczepanik, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Synthesis of Epitaxial Layers of Mixed $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{O}$ on $\text{MgO}(001)$ ", 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
124. N. Spiridis, K. Freindl, W. Karaś, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zajac, J. Korecki "Surface Electronic Properties of $\text{Fe}(001)$ Probed via Hyperfine Interactions", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011

125. N. Spiridis, D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, B. Figarska, J. Korecki "STM Studies of Gold Nanostructures on Vicinal FeO/Pt(997) Surface", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
126. N. Spiridis, M. Zając, D. Wilgocka-Ślęzak, K. Freindl, A. Kozioł-Rachwał, M. Ślęzak, T. Ślęzak, J. Korecki "Dynamic Properties of Ultrathin FeO on Pt(111) Studied with Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", European Conf. on Surface Science ECOSS 28, Wrocław 2011
127. M. Szaleniec, A. Salwiński, T. Borowski, M. Witko "Prediction of Ethylbenzene Dehydrogenase Activity with Quantum Chemical Modeling", Konf. 'Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych HITY 2011', Kraków 2011
128. M. Szaleniec, A. Salwiński, T. Borowski, M. Witko "Prediction of Ethylbenzene Dehydrogenase Activity with Quantum Chemical Modeling", 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conf. QBIC 2011, Cesky Krumlov 2011
129. M. Szczepanik, R. P. Socha, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Synteza i właściwości epitaksjalnych warstw tlenków manganu na MgO(001)", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
130. K. Szczepanowicz, H. J. Hoel, G. Gaudernack, P. Warszyński "Functionalized Polyelectrolytes Nanocapsules with Emulsion Core for Targeted Drug Delivery", 1st Int. Symp. on Colloids and Materials, Amsterdam 2011
131. K. Szczepanowicz, T. Kruk, M. Kolasińska, J. Stefańska, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Thin Films with Antimicrobial Properties", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
132. K. Szczepanowicz, T. Kruk, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Functional Nanocapsules for Targeted Drug Delivery", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
133. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Targeted Delivery System for Therapy of Schizophrenia", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
134. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Functional Nanocapsules for Targeted Drug Delivery", 19th Int. Conf. on Bioencapsulation, Bioencapsulation Research Group, Amboise 2011
135. K. Szczepanowicz, S. Łukasiewicz, M. Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Nanocapsules for Targeted Drug Delivery", 18th Int. Symp. on Microencapsulation, Antalya 2011
136. K. Szczepanowicz, B. Martins, M. F. Montemor, P. Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules Containing MBT Inhibitor for Corrosion Protection of AA2014 Alloys, 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011

137. L. Szyk-Warszyńska, J. Piekoszewska, P. Warszyński "Stability of PLL/Casein Multilayer Films in the Aqueous Media with Various pH Analyzed by Ellipsometry and QCM", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
138. M. Ślęzak, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, T. Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, J. Korecki "Growth and Spin Structure of Ultrathin Fe Films on W(110)", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
139. M. Ślęzak, T. Ślęzak, A. Koziół-Rachwał, K. Matlak, K. Freindl, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, M. Zając, R. Ruffer, E. Partyka-Jankowska, J. Korecki "Magnetism of Nanoscale Fe Islands on W(110)", Workshop on Novel Trends in Optics and Magnetism of Nanostructures, Augustów 2011
140. M. Tataruch, A. Dudzik, A. Salwiński, M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Reaktywność i stereoselektywność dehydrogenazy etylobenzenowej w reakcji biosyntezy chiralnych alkoholi drugorzędowych", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
141. R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Wpływ jonu centralnego na charakter centrów aktywnych w heteropolikwasach molibdenowych i wolframowych. Obliczenia klasterowe DFT", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2011
142. J. Waga, J. Zientarski, A. Skoczowski, M. Szaleniec "Efektywność wykorzystania kolumn chromatograficznych typu Poroshell w badaniach białek gliadynowych metodą RP-HPLC", Konf. Nauka dla Hodowli i Nasiennictwa Roślin Uprawnych, Zakopane 2011
143. T. Urbańczyk, M. Krośnicki, M. Strojceki, J. Koperski "Splątane atomy kadmu: od metod wytwarzania do testów nierówności Bella", 41. Zjazd Fizyków Polskich, Lublin 2011
144. T. Urbańczyk, M. Krośnicki, M. Strojceki, J. Koperski "Experiments with Supersonic Beam from Molecular Rotations Towards Entanglement of Atoms", Konf. "Technologie Kwantowe 2011", Warszawa 2011
145. D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, K. Matlak, B. Strzelczyk, B. Figarska, J. Korecki "Ultrathin FeO and Fe₃O₄ Oxides on Pt(111)", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
146. D. Wilgocka-Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki "Nanoscale Spectro-Microscopy For Krakow Synchrotron", TEAM AMON Workshop, Zakopane 2011
147. D. Wilgocka-Ślęzak, M. Ślęzak, N. Spiridis and J. Korecki "SPINLAB LEEM/PEEM in Kraków", Workshop on Novel Trends in Optics and Magnetism of Nanostructures, Augustów 2011
148. M. Witko, D. Rutkowska-Zbik, R. Gryboś, R. Tokarz-Sobieraj "DFT Studies on Formation of Oxocarbides from MoO₃", 10th European Congr. on Catalysis EuropaCat X, Glasgow 2011
149. A. Wójcik, E. Broclawik, T. Borowski "Theoretical Insights into the Mechanism of the Catalytic Reaction of 4-Hydroxymandelate Synthase - Factors Affecting the Reaction Specificity", 3rd Quantum Bioinorganic Chemistry Conf. QBIC 2011, Cesky Krumlov 2011

150. M. Wyrwał, B. Jachimska, J. Bednar, M. Kępczyński, M. Nowakowska "Stabilization of Liposomes by Modified Poly(allylamine hydrochloride)", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
151. M. Zaucha, Z. Adamczyk "Characterization of Colloid Particles Mono- and Bilayers by the Streaming Potential Study", 21st Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, Krakow 2011
152. J. Zawała, S. Dorbolo, D. Terwagne, N. Vandewalle, K. Małyśa "Influence of Size of the Liquid Film Formed on the Bubble Bouncing and Coalescence at Liquid/Air Interface", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
153. J. Zawała, S. Dorbolo, D. Terwagne, N. Vandewalle, K. Małyśa "Influence of Size of the Liquid Film Formed on the Bubble Bouncing and Coalescence at Liquid/Air Interface", 25th Conf of European Colloid and Interface Society ECIS, Berlin 2011
154. M. Zimowska, R. Dula, B. Napruszewska, R. P. Socha, J. Gurgul, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Superior Catalytic Properties of the Copper-manganese Spinel in Total Combustion of Toluene over Cu-Mn-Al Mixed Oxides Derived from Hydrotalcite Type Compounds", 14th European Conf. on Applications of Surfaces and Interface Analysis ECASIA'11, Cardiff 2011
155. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, R. Dula, D. Mucha, E. M. Serwicka "Kinetyka rekonstrukcji struktury hydrotalkitów MgAl", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011
156. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalik-Zym, R. Dula, D. Mucha, E. Bielańska, E. M. Serwicka "Specific Surface Area of Hydrotalcite-derived Mixed CuMnAl (1:2:1) Oxides as a Function of Precursor Phase Composition and Crystallinity", European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011
157. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, A. Michalik-Zym, R. Dula, D. Mucha, E. M. Serwicka "Kinetyka rekonstrukcji struktury hydrotalkitów ZnAl", 43. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2011
158. M. Zimowska, B. D. Napruszewska, D. Mucha, A. Michalik-Zym, R. Dula, E. M. Serwicka "Kinetics of Hydrotalcite Structure Recovery from Calcined Zn-Al Precursors", European Clay Conf. EUROCLAY 2011, Antalya 2011

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. Z. Adamczyk "Mechanizmy adsorpcji białek: fakty i mity", Zakład Mechaniki i Fizyki Płynów, Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa 2011
2. Ł. Bratasz, B. Rachwał, M. Łukomski, R. Kozłowski "Panel Paintings - Balancing Preservation Needs and Cost", Smithsonian Institution, Washington 2011
3. Ł. Bratasz, B. Rachwał, M. Łukomski, R. Kozłowski "Panel Paintings - Balancing Preservation Needs and Cost", Metropolitan Museum, New York 2011

4. M. Derewiński "Composite Porous Materials Containing Zeolitic Domains Prepared by Controlled Partial Recrystallization of Amorphous Porous Matrix", NIMS, International Center for Materials Nanoarchitectonics, Tsukuba 2011
5. M. Derewiński "Enhanced Catalytic Performance of Bifunctional Catalysts Prepared Using a Carbon-Templated MFI Zeolite as Active Support", NIMS, International Center for Materials Nanoarchitectonics, Tsukuba 2011
6. M. Derewiński "Enhanced Catalytic Performance of Catalysts Prepared Using a Carbon-Templated MFI Zeolite", ERIC Lecture, Technische Universität, Department Chemie, Munich 2011
7. M. Derewiński "Is Modification of HZSM-5 Zeolite with Phosphorous Irreversible?", ERIC Lecture, Technische Universität, Department Chemie, Munich 2011
8. M. Grzesiak, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Microdiffraction as a Tool in Investigations of the Object of Cultural Heritage", Nanotechnology Centre, Technical University, Ostrava 2011
9. A. Kania, G. Stochel, M. Pilch, L. Fiedor, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Właściwości koordynacyjne bakteriochlorofili w warunkach wysokiego ciśnienia: badania teoretyczne", Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, 2011
10. J. Korecki "Czy powierzchnię rzeczywiście wymyślił diabeł?", Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH, 2011
11. J. Korecki "Żelazo na wolfranie W(110) - dobrze znany układ badany nową metodą i co z tego wyniknęło", Instytutu Fizyki Doświadczalnej, Wydział Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Wrocławskiego, 2011
12. J. Korecki "O magnetycznych właściwościach pewnych nanostruktur - czyli dobrze znany układ badany nową metodą i co z tego wyniknęło", Krakowskie Konwersatorium Fizyczne, Instytut Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego, 2011
13. J. Korecki "Structure and Magnetism of FeO Films on Pt(111)", Institute of Applied Physics, University of Hamburg, 2011
14. K. Luberda-Durnaś, W. Łasocha "Hybrid Organic-inorganic Layered Materials, Precursors of Semiconducting Nanostructures", Nanotechnology Centre, Technical University, Ostrava 2011
15. W. Łasocha "Powder Diffraction in Chemistry and Material Science", Nanotechnology Centre, Technical University, Ostrava 2011
16. M. Łukomski "Interferencyjne badania mikrouszkodzeń warstw malarskich - strategia ochrony obiektów zabytkowych", Polskie Towarzystwo Fizyczne, Oddział w Krakowie 2011
17. M. Łukomski, M. Strojcki, Ł. Bratasz "*Greening* of Museums a Path to Rational Climate Control Strategies for the Collection Care", Victoria & Albert Museum, London 2011

18. A. Micek-Ilnicka "Powierzchnie samooczyszczające się: "efekt liści lotosu" jako przykład biomimetyki", Wydział Chemii UJ, Kraków 2011
19. G. Mordarski "Węglowe ogniwo paliwowe oparte na elektrolizie ze stopionych węglanów (DC-MCFC)", Konsorcjum 'Węglowe Ogniwa Paliwowe', Boguchwała 2011
20. P. Nowak "Siarczki miedzi: struktura elektronowa, adsorpcja surfaktantów a podatność na ługowanie", Zakład Metalurgii Chemicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, 2011
21. P. Nowak "Oxidation of Pyrite - Can We Prevent It?", Nordkalk Corporation, Pargas 2011
22. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Theoretical Description of Active Phase of MoO₃/ZSM-5 Catalyst", J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry AV CR, Prague 2011
23. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "DFT Description of Active Phase of MoO₃/ZSM-5 Catalyst", NEXT-GTL Consortium Meeting, Frankfurt M 2011
24. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Preliminary Studies on the Mechanism of Methane Activation and Transformation to Ethylene on MoO₃/ZSM-5 Catalyst", NEXT-GTL Consortium Meeting, Brussels 2011
25. B. Sulikowski "Kilka uwag na temat fizykochemii zeolitów w świetle badań NMR", Katedra Fizyki, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków 2011
26. M. Szaleniec, A. Dudzik, D. Knack, M. Witko, J. Heider "Theoretical Modeling of Ethylbenzene Dehydrogenase Reactivity and Enantioselectivity with Cluster DFT Calculations", Max-Planck-Institut für terrestrische Mikrobiologie, Marburg 2011
27. R. Tokarz-Sobieraj "Uzyskiwanie stopnia naukowego doktora i możliwości stypendialne dla doktorantów", 1. Warsztaty Naukowe ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości, Zakopane 2011
28. R. Tokarz-Sobieraj "Procedura uzyskiwania stopnia naukowego doktora w świetle nowych przepisów", Warsztaty jesienne MOL-MED 2011 Molekularne i genetyczne aspekty chorób układu nerwowego, Kraków 2011
29. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Theoretical modeling of C-H activation on metalorganic complexes. Electronic structure of HPA", NEXT-GTL Consortium Meeting, Frankfurt M 2011
30. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Oxidative Function of HPA", NEXT-GTL Consortium Meeting, Brussels 2011
31. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, R. Gryboś "CH₄ Activation and Oxidation", NEXT-GTL Consortium Meeting, Milano 2011

WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. E. Bielańska "Elektronowa mikroskopia skaningowa i transmisyjna", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (2 godz.)
2. E. Bielańska "Elektronowa mikroskopia skaningowa i transmisyjna", wykład dla doktorantów ISD (4 godz.)
3. T. Borowski "Chemia kwantowa makrocząsteczek", zajęcia komputerowe dla studentów III roku kierunku "Biofizyka", Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński (30 godz.)
4. Ł. Bratasz "Konserwacja, kształtowanie architektury i aranżacja wewnątrz obiektów sakralnych", wykłady dla studium podyplomowego Politechniki Krakowskiej (4 godz.)
5. E. Broclawik "Struktura, spektroskopia i oddziaływania", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (14 godz.)
6. E. Broclawik "Chemia kwantowa makrocząsteczek", wykład kursowy dla kierunku w Instytucie Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ (30 godz.)
7. E. Broclawik "Stosowana Chemia Kwantowa", wykład monograficzny dla doktorantów Środowiskowego Studium Doktoranckiego przy Wydziale Chemii UJ (30 godz.)
8. E. Broclawik "Metody doświadczalne i obliczeniowe badań fizykochemicznych własności materiałów", wykład dla doktorantów ISD (8 godz.)
9. M. Derewiński "Spektroskopia IR i Ramana", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
10. M. Derewiński "Wstęp do spektroskopii w podczerwieni i Ramana", wykład dla doktorantów ISD (4 godz.)
11. A. Drelinkiewicz "Chemia fizyczna", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (20 godz.)
12. A. Drelinkiewicz "Kataliza", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (12 godz.)
13. R. Grabowski "Adsorpcja, kinetyka, reaktory", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (6 godz.)
14. J. Gurgul "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis", wykłady w Akademii Górniczo-Hutniczej (2 godz.)
15. B. Jachimska "Metoda Dynamicznego Rozpraszania Światła (DLS): pomiary wielkości cząstek koloidalnych", wykład dla 4 roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (2 godz.)

16. B. Jachimska "Laser Doppler Velocimetry - pomiary ruchliwości elektroforetycznej cząstek koloidalnych", wykład dla 4 roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (2 godz.)
17. R. Kozłowski "Panel Paintings - Understanding, Deterioration, Mechanisms and Conservation Practices", wykłady w ramach Kraków Summer Institute (Akademia Sztuk Pięknych w Krakowie, The Getty Conservation Institute, Los Angeles) (4 godz.)
18. M. Łukomski "Panel Paintings - Understanding, Deterioration, Mechanisms and Conservation Practices", wykłady w ramach Kraków Summer Institute (Akademia Sztuk Pięknych w Krakowie, The Getty Conservation Institute, Los Angeles) (2 godz.)
19. P. Nowak "Metody doświadczalne i obliczeniowe badań fizykochemicznych własności materiałów", wykład dla doktorantów ISD (4 godz.)
20. P. Nowak "Nowoczesne materiały dla katalizy", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
21. P. Nowak "Metody doświadczalne w badaniach fizykochemicznych", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN i ISD MolMed (4 godz.)
22. P. Nowak "Chemia fizyczna", wykład dla doktorantów ISD MolMed (4 godz.)
23. E. M. Serwicka-Bahranowska, "Minerały w katalizie" - wykład na Wydziale Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH, (10-godz.)
24. B. Sulikowski "Wstęp do spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (4 godz.)
25. P. Warszński "Chemia Fizyczna", wykład dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN (12 godz.)

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. A. G. Chmielewski (Instytut Chemii i Techniki Jądrowej, Warszawa) "Rola chemii i inżynierii chemicznej w energetyce jądrowej"
2. S. Dorbolo, F. Moreau (Université Liège) "Manipulation of Droplets without Contact"
3. L. Kajendra (Department of Mathematics, The Madura College) "Non-linear Reaction-Diffusion Relations in Physical Chemistry"
4. M. Kosmulski (Politechnika Lubelska) "Hirsch Index and Its Modifications"
5. M. Krasowska (Ian Wark Research Institute) "Absolute Surface Separation in AFM Measurements in Systems Involving Soft Bodies"

6. T. Majkowski (Uniwersytet Jagielloński) "O, choinka !" [wykład bożonarodzeniowy]
7. K. Małek (Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego) "Jak wzmocnić sygnał Ramana, czyli o oddziaływaniu z powierzchnią"
8. W. Minor (University of Virginia) "Towards the Future of Structural Biology"
9. V. Stanciu (National Research and Development Institute for Cryogenic and Isotopic Technologies, Valcea) "Advanced Materials and Their Applications in ICIT Rm. Valcea"
10. A. Szmalc (Fuego, Warszawa) "Użytkowanie sprzętu komputerowego - aspekty prawne"
11. S. Waltoś (Muzeum Uniwersytetu Jagiellońskiego) "Kraków zabytkowy a Kraków nowoczesny" [wykład wielkanocny]
12. M. Żylicz (Fundacja na rzecz Nauki Polskiej) "Chemia a życie"
13. M. Żylicz (Fundacja na rzecz Nauki Polskiej) "Czy Maria Curie-Skłodowska potrzebowała sponsora?"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. J. Barbasz "Adsorpcja białka na powierzchniach hydrofilowych"
2. A. Bielański "Profesor Jerzy Haber"
3. E. Lalik "Oscylacyjny charakter wydzielania ciepła w reakcji wodoru z palladem metalicznym"
4. D. Wilk "Mechanizm powstawania spękań w zabytkowych zaprawach romańskich"

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. E. Jarek "Czy białe jest białe i dlaczego widzimy świat w kolorach?"
2. A. Micek-Ilnicka "Sprzątanie świata bez wysiłku"
3. E. Młyńczak, T. Giela "Jak działają wyświetlacze - od kineskopu do e-papieru"
4. D. Rutkowska-Żbik "Maria Curie-Skłodowska - Polka Wszechczasów"
5. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Alchemia - wiedza tajemna, magia, nauka"

WYKŁADY POPULARNO-NAUKOWE

1. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska - kobieta niezwykła. Piotr Curie - życie i działalność". Gimnazjum w Mircu, 2011
2. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska - życie i działalność naukowa". Szkoła Podstawowa w Jagodnem, 2011

3. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska - kobieta niezwykła. Piotr Curie - życie i działalność", Miejska Biblioteka Publiczna w Starachowicach, 2011
4. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Maria Curie-Skłodowska i Piotr Curie", Liceum Ogólnokształcące w Skarżysku Kamiennej, 2011.
5. M. Zimowska, pokazy naukowe, Szkoła Podstawowa 126 im. KEN w Krakowie, 2011

NADANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

DOKTORA

1. M. Śliwa "Synteza i właściwości fizykochemiczne katalizatorów hybrydowych do otrzymywania eteru dimetylowego" (promotor R. Grabowski)
2. A. Trybała "Osadzanie modelowych mikrokapsulek na powierzchniach metalicznych modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitów" (promotor P. Warszński)

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

1. Symposium "Women Sharing a Chemical Moment in Time", Krakow, January 18th, 2011 (M. Witko, D. Rutkowska-Żbik)
2. XLIII Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 'Nowe procesy katalityczne', Kraków, 16-18 marca 2011 (B. Sulikowski)
3. International Spring School BES 'Novel Techniques for Nanobiological Sciences', Krakow, May 7th-12th, 2011 (B. Jachimska)
4. XXIst International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society (BES), Krakow, May 8th-12th, 2011 (B. Jachimska)
5. Konferencja "HITY-2011 Zastosowanie teorii w badaniach molekularnych", Kraków, 18-20 maja 2011 (M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj)
6. Joint Final Conference of COST Actions IE0601 and MP0601, Paris, November 14th-18th, 2011 (R. Kozłowski, Ł. Bratasz)
7. EnviControl Final Workshop, Krakow 2011, Krakow, November 23rd, 2011 (R. Kozłowski, Ł. Bratasz)
8. Symposium "Women in Science", Warszawa, November 25th, 2011 (M. Witko, D. Rutkowska-Żbik)

IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. Festiwal Nauki 'Materia-Człowiek-Kultura', Rynek Główny, Kraków, 11-14 maja 2011 (M. Derewiński)
2. Piknik Naukowy 'Międzynarodowy Rok Chemii, Rok Marii Curie-Skłodowskiej', Instytut Chemii Fizycznej PAN i Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa, 2-3 czerwca 2011 (M. Derewiński)
3. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 24 października 2011 (R. Kozłowski)

REPORT of the INTERNATIONAL ADVISORY BOARD
RESEARCH ACTIVITIES of 2010-2011
Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry,
Polish Academy of Sciences

Introduction

The Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS (shortly indicated as Institute hereinafter) addresses a field at the interface of chemistry, physics, biology, engineering and material sciences that enables chemical processes to be realized with cost-, energy- and eco-efficiency, thus making a key contribution to:

- (i) sustainable energy and mobility;
- (ii) rational use of resources;
- (iii) quality of life and health;
- (iv) environmental protection;
- (v) cultural heritage preservation.

To address these relevant socio-economical issues it is necessary to have a critical mass of well-integrated competences, which can combine the fundamental knowledge and an applied vision. It is necessary to coherently integrate competences on dry and wet surfaces, and therefore it is appreciated that the Institute collects expertise and research on fundamental and applied catalysis, surface and interface science, and material and colloid science.

Research, education and promotion of science

The Institute is well suited to achieve the above objectives and has its points of strength in the following aspects:

- The Institute has a leading position in Poland. It was ranked in 2010 by the Polish Ministry of Science and Higher Education (hereinafter indicated as Ministry) at the 2nd place among 41 Polish research chemical institutions. It is well positioned in the European Research Area and has worldwide visibility. The high number of research contracts, as well as the participation in European projects and networks in all the fields of expertise of the Institute is remarkable. The Institute has established a good number of international collaborations.
- The Institute holds multi-disciplinary competences, going from fundamental and applied aspects of catalysis, advanced materials, interface and colloid science, cultural heritage protection. It combines theoretical and experimental expertise. It provides a forum for sharing ideas and concepts.
- Publications and conference contributions, keynote and plenary lectures at national and international meetings, are in line with international standards and above the requirements indicated by the Ministry.
- The ratio of the number of PhD and master students over available supervisors is good and well distributed among the research groups. The number of students was increased with respect to the previous evaluation due to the effort in obtaining special grants and to the good relations with universities. The Institute achieves excellent integration of research and education.
- The effort towards public awareness on science remains outstanding.

D. P.
P. D.
VP EB

Funding aspects

Running an Institute with a strong fundamental research programme requires a good balance of institutional, national and international funding. The Institute has made a good effort to search for national and international funding via open calls to complement the limited governmental budget. The Advisory Board feels that this direction should be further strengthened with an increased effort to the possibilities offered for international PhD students, such as the Marie Curie-grants, and for research projects supported by companies. The Advisory Board appreciates the significant amount of funding provided by the Ministry for new equipment and maintenance of the infrastructure. The Institute was able with this support to acquire unique experimental facilities.

Personnel policy

The Institute has significantly increased the number of PhD students due to the growth in the number of grants and new types of projects to support PhD and post-docs. The Advisory Board appreciates that the amount of the individual grants was increased. Effort should be dedicated to attract foreign PhD students and post-docs. The international mobility of both senior and young researchers to strength collaborations should be promoted.

The fundamental research vision of the Institute requires continuity in human resources and knowledge transfer, and promotion of the individual quality and excellence. The Advisory Board appreciates Institute's policy for selection and promotion of young researchers, and the effort given to increase internal and external collaborations at national and international level.

Scientific productivity

The Advisory Board is satisfied with the scientific productivity, both with respect to quality and quantity, and above the criteria indicated by the Ministry.

Relations with the industrial sector

The Advisory Board appreciates a progress in the relations with industry as documented by the patents, expertise reports and the projects with Polish institutions, and with national and foreign industry. A further promotion of these activities is necessary to consolidate the research activity of the Institute.

Opportunities

The new research facilities of the Institute extend the opportunities for new topics and collaborations in the area of surface and material science, and catalysis.

P. D.
D. P.
VP. SB

Recommendations

Funds:

The management of Institute should be congratulated for attracting a high level of external funds for research, equipment and students. It is necessary to continue this effort and look at all possibilities to increase this external funding to contrast the decreased statutory budget.

Structuring research:

The effort to aggregate the research topics into larger common projects should be continued to highlight the identity and increase the visibility of the Institute. The Advisory Board considers as positive the formation of groups guided by young people via projects/funds they obtained in „hot” areas of research. The Advisory Board recommends the Institute to continue in this direction for an optimal balance between research independence and the need to reduce fragmentation.

Expanding scientific capacities:

The Institute has progressed in collaboration with other institutions specialized in chemical engineering. The Advisory Board recommends continuing in this direction and creating also internal competences in the field of chemical engineering that could complement the existing field of expertise and foster the interaction with companies.

IT infrastructure:

The IT facilities have been restructured and audited on the legal aspect. The creation of a faster Internet line (optical cable) will improve the capacity of scientific information, communication and data elaboration, particularly important for the theory and modelling, which are points of excellence of the Institute.

Publications:

The quality of the publications is good and above the requirements of Ministry. A further effort should be dedicated to publish in high impact factor journals and in preparing high quality reviews to strength the international visibility.

International mobility:

The Advisory Board encourages an effort in attracting foreign students and scientists, and in promoting international mobility.

Krakow, January 31st, 2012

International Advisory Board

Name

Signature

Ewa Bulska

Gabriele Centi

Philippe Déjardin

Valentin Parmon

Dimo Platikanov

WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

51 wypis z Protokołu z V posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, kadencji 2011-2014, w dniu 10 maja 2012 roku dotyczący Sprawozdania z działalności naukowej Instytutu w roku 2011.

Sprawozdanie z działalności naukowej Instytutu w roku 2011.

Przewodnicząca Rady oddała głos Z-cy Dyrektora ds. Naukowych prof. Romanowi Kozłowskiemu. Prof. R. Kozłowski przedstawił trzy główne zagadnienia dotyczące działalności badawczej, organizacyjnej i edukacyjnej.

W naszej działalności statutowej realizujemy 6 tematów, a w każdym z nich po kilka zadań:

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów (5)
2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju (6)
3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy (9)
4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów (3)
5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe (2)
6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

Struktura środków pozyskiwanych zewnątrz:

Sukcesy odnieśliśmy głównie w pozyskiwaniu licznych grantów NCN dla młodych badaczy:

- 3 projekty SONATA - unikatowy warsztat naukowy dla młodych badaczy ze stopniem doktora
- 2 projekty badawcze OPUS
- 1 projekt PRELUDIUM dla młodych badaczy rozpoczynających karierę naukową nieposiadających stopnia doktora

Mamy też granty Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej:

- 1 projekt POMOST – grant dla rodziców ułatwiający powrót do pracy naukowej
- 1 projekt HOMING PLUS – grant dla polskich badaczy powracających z zagranicy

Kontynuujemy duży blok grantów MNiSW:

- 21 projektów badawczych własnych
- 6 projektów promotorskich
- 8 projektów IUVENTUS PLUS

Ważnym źródłem finansowania są Fundusze strukturalne Unii Europejskiej:

- 5 projektów Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka
- 2 projekty Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki

Jeśli chodzi o projekty międzynarodowe, zakończyliśmy 2 projekty 6. Programu Ramowego Unii Europejskiej, poza tym posiadamy:

- 6 projektów 7. Programu Ramowego Unii Europejskiej
- 2 projekty wspierające udział w akcjach COST
- 3 projekty na podstawie umów dwustronnych

Podsumowując prof. R. Kozłowski przedstawił tabelę udziału środków z poszczególnych grup projektów. Środki stałe, jakimi dysponujemy, pochodzące z działalności statutowej stanowią kwotę ok. 6 mln zł, natomiast pozyskane przez nas środki zewnętrzne, przewyższają tę kwotę prawie dwukrotnie

(ok. 10 mln zł), w tym ok. 8 mln zł to środki krajowe, w których dominują Fundusze Strukturalne.

Dorobek naukowy, który wyniknął z realizacji tych projektów to:

- Przeglądy i rozdziały w monografiach - 5
- Artykuły w czasopismach międzynarodowych (Thomson Reuters JCR) – 70
- Artykuły w innych czasopismach i książkach – 16
- Artykuły w recenzowanych materiałach konferencyjnych – 17
- Streszczenia w materiałach konferencyjnych – 188
- Inne opracowania (ekspertyzy) – 8
- Publikacje instytutu (zbiory abstraktów) – 3
- Specjalne wydanie Catalysis Today poświęcone pamięci prof. Jerzego Habera

Następnie prof. R. Kozłowski omówił strukturę zatrudnienia, wskazując, że na całkowitą liczbę 108 pracowników,

- 47 to pracownicy naukowcy, w tym 19 samodzielnych pracowników naukowych
- 28 pracowników badawczo-technicznych
- 19 młodych doktorów (poniżej 35 lat).

Prof. R. Kozłowski przedstawił też punktację MNiSW w odniesieniu do publikowanych przez pracowników Instytutu 70 publikacji (z listy Thomsona Reutersa JCR) oraz liczbę publikacji odpowiadającą maksymalnej punktacji:

- 32 punkty – 41 publikacji (co stanowi 59%)
- 27 punktów – 14 publikacji
- 20 punktów – 7 publikacji
- 13-2 punktów – 8 publikacji

Projekt rozporządzenia MNiSW w sprawie oceny osiągnięć naukowych przewiduje wzięcie pod uwagę 3N najlepszych publikacji w okresie 4 lat, gdzie N jest średnią arytmetyczną liczby pracowników naukowych, badawczo-technicznych (specjalistów), inżynierskich i technicznych z okresu objętego oceną (1 miejsce pracy, bez przeliczania na pełne etaty).

W latach 2009-2011 liczba pracowników w Instytucie wynosiła $N = 70,25$.

Ministerstwo przeprowadzi ocenę według w/wym. zasad w 2013 r., stąd okresem ocenianym będą lata 2009-2012.

Prof. R. Kozłowski wyraził zadowolenie, że w ciągu ubiegłych trzech lat, będących okresem przyszłej oceny, Instytut opublikował 152 publikacje 32 punktowe, co stanowi niewiele mniej niż prognozowana na ten okres wartość $3N \times 3/4 = 158$ publikacji.

W dalszej części prof. R. Kozłowski przedstawił publikacje, stanowiące największe osiągnięcia naukowe Instytutu za ubiegły rok:

- **Określenie mechanizmu adsorpcji fibrynogenu na powierzchniach nośników koloidalnych (lateksów polistyrenowych)**
Zbigniew Adamczyk, Anna Bratek-Skicki, Paulina Dąbrowska, Małgorzata Nattich-Rak
- **Właściwości koordynacyjne chlorofilu w rozpuszczalnikach organicznych**
Dorota Rutkowska-Żbik, Małgorzata Witko
- **Ograniczenia nanoprzestrzenne w kanałach mezoporowatego nośnika jako czynnik warunkujący aktywność katalityczną organometalicznego centrum aktywnego**
Dorota Duraczyńska, Ewa M. Serwicka, Alicja Drelinkiewicz, Dorota Rutkowska-Żbik, Małgorzata Witko, Robert P. Socha, Małgorzata Zimowska, Zbigniew Olejniczak

Instytut wykonuje również różnego rodzaju ekspertyzy, w ubiegłym roku miały miejsce trzy ekspertyzy:

- Ł. Bratasz, R. Kozłowski – Norma Europejska EN 15759:2011 „Konserwacja Dóbr Kultury – Klimat wewnątrz - Część 1: Wskazówki co do Ogrzewania Kościołów, Kaplic i Innych Miejsc Kultu, „CEN Technical Committee 346 „Conservation of Cultural Property“ (2 inne normy w 2010)
- Drelinkiewicz "Amylterahydroanthraquinone Formation with Palladium-polyaniline-silica Catalyst-hydrogen Peroxide Amylanthraquinone Process, Study of Working Solution Chemistry in Deep Hydrogenation Conditions" Solvay Research and Technology, Bruksela
- E. M. Serwicka-Bahranowska, T. Machej, „Badania właściwości fizykochemicznych i katalitycznych katalizatorów do hydroizomeryzacji oleju napędowego (the dewaxing reaction)", PKN Orlen S.A.

Uzyskaliśmy również jeden patent.

Kolejnym punktem było omówienie struktury Studiów doktoranckich. Łącznie mamy 51 doktorantów, co przy 47 pracownikach naukowych daje ponad 1 doktoranta na pracownika. W ubiegłym roku odbyła się obrona 2 doktoratów.

Na zakończenie prof. R. Kozłowski omówił aktywność pracowników IKiFP PAN w organizacji i współorganizacji konferencji naukowych, a także organizacji działań promujących Instytut, jak organizacja Dnia Otwartego Instytutu, czy udział w Festiwalu Nauki.

Prof. M. Nowakowska podsumowując sprawozdanie podkreśliła dwa elementy: wysoką jakość publikacji i bardzo dynamiczny rozwój studiów doktoranckich. Rada Naukowa z zadowoleniem i akceptacją przyjęła Sprawozdanie z działalności naukowej IKiFP PAN.

Prof. M. Nowakowska poprosiła o zabranie głosu Główną Księgową Instytutu Panią mgr Dorotę Radoń, która omówiła finansowe aspekty działalności Instytutu w roku 2011.

Rada Naukowa przyjęła do wiadomości ustalenie sum pasywów i aktywów w kwocie 5 711 403,31 zł oraz uzyskanego zysku netto w kwocie 344 080,24 zł.

Zgodnie z art.85 ust 5 ustawy z dnia 30 kwietnia 2010r o Polskiej Akademii Nauk (Dz.U. 2010.96.619) Rada Naukowa przychyliła się do wniosku Dyrektora Instytutu, aby 92% zysku netto tj. 316 553,82 zł przeznaczyć na fundusz statutowy, a 8% zysku netto tj. 27 526,42 zł przeznaczyć na fundusz rezerwowy. W głosowaniu jawnym Rada Naukowa jednogłośnie podjęła stosowną uchwałę.

za zgodność z protokołem:

Sekretarz Rady Naukowej IKiFP PAN

dr hab. Tomasz Borowski