

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



**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2012**



Kraków, marzec 2013

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2012	9
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2012	15
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2012	21
Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący	21
Działalność statutowa Instytutu	25
Projekty badawcze własne	65
Projekty badawcze promotorskie	83
Projekty badawcze "Sonata"	87
Projekty badawcze "Opus"	95
Projekty badawcze "Preludium"	105
Projekty badawcze "Iuventus Plus"	111
Projekty "Mobilność Plus"	115
Projekty "Homing Plus"	119
Projekty "Pomost"	123
Projekty strategiczne	127
Projekty "Lider"	131
Projekty 6. Programu Ramowego UE	135
Projekty 7. Programu Ramowego UE	139
Projekty EU COST Action	147
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	151
Inne międzynarodowe projekty badawcze	163
Inne zadania	169
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2012	175
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	175
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	207
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	237

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA POLSKIEJ AKADEMII NAUK

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 cztery podstawowe kierunki:

1. Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju
2. Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria
3. Nanostruktury materii miękkiej
4. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

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 dziedzinie było określenie oddziaływania złota z tlenkowym nośnikiem dla modelowego katalizatora w postaci nanoklasterów Au osadzonych na $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$. Zastosowano spektroskopię mössbauerowską elektronów konwersji (CEMS) do bezpośredniej obserwacji powierzchniowej struktury elektronowej nośnika i spektroskopię fotoelektronów (XPS) do określenia stanu złota. Zaobserwowano silną modyfikację struktury elektronowej tlenku wywołaną obecnością Au w obszarze znacznie przekraczającym powierzchnię kontaktu, co wpływa na stopień polaryzacji klasterów złota i jest możliwą przyczyną obserwowanego efektu rozmiarowego w aktywności katalitycznej tego pierwiastka.

Z kolei w obszarze biokatalizy uzyskano szeroką charakterystykę mechanizmu reakcji dehydrogenazy etylobenzenowej metodami eksperymentalnymi (pomiar kinetyczne, chromatograficzna analiza produktów reakcji) oraz teoretycznymi (obliczenia DFT na modelach klasterowych oraz metodą QM:MM dla całej podjednostki enzymu). Wyniki pozwoliły na wyjaśnienie mechanizmu i enancjoselektywności reakcji oraz zaproponowanie alternatywnych ścieżek katalitycznych dla substratów konwertowanych do produktów innych niż drugorzędowe alkohole alkiloaromatyczne o konfiguracji *S*.

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 było opracowanie metodyki badań wpływu anizotropii magnetycznej na właściwości układów zawierających nanocząstki magnetyczne. Zastosowano sprzężenie klasycznej dynamiki newtonowskiej z procesami rotacji Neela zachodzącymi w układach zawierających nanocząstki superparamagnetyczne. Dzięki temu uzyskano możliwość badań dynamiki przemian strukturalnych w takich układach.

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.

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.

W tym ostatnim obszarze zakończono wieloletnie badania nad odpowiedzią drewna polichromowanego na zmiany wilgotności względnej i temperatury. Badania obejmowały adsorpcję i dyfuzję pary wodnej, właściwości mechaniczne materiałów i fizyczne metody śledzenia uszkodzeń. Przeprowadzono analizę czasową odpowiedzi drewnianego podobrazia, uściślono kryterium zagrożenia uszkodzeniami przez analizę odpowiedzi całego wielowarstwowego układu, uwzględniono efekty zmęczeniowe. Wyniki wprowadzono do praktycznej konserwacji poprzez opracowanie norm polskich i europejskich oraz publikację syntetycznego opracowania „Dopuszczalne wahania mikroklimatyczne dla drewna polichromowanego” w *Studies in Conservation* – czołowym międzynarodowym czasopiśmie poświęconym konserwacji obiektów zabytkowych.

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

Instytut otrzymał na lata 2012-2017 roku status Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego KNOW w zakresie nauk fizycznych w ramach Krakowskiego Konsorcjum Naukowego im. Mariana Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" wspólnie z Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Wydziałem Chemii UJ, Wydziałem Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ oraz Instytutem Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN.

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 szczyci 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, Klasterze 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 posiadał 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 2012

Krajowy Naukowy Ośrodek Wiodący (MNiSW)

1. Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. M. Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" [2012-2017] **23**

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

- 1.1. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych **29**
- 1.2. Nowe perokso-związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne zastosowania w procesach utleniania **30**
- 1.3. Całkowite utlenianie zanieczyszczeń organicznych z zastosowaniem ceramicznych strukturalnych katalizatorów piankowych **31**
- 1.4. Procesy fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza - efekty synergiczne **32**
- 1.5. Fizykochemia układów: heteropolikwas – materiał mezoporowaty typu MOF **33**
- 1.6. Wykorzystanie nanocząstek sit molekularnych w syntezie materiałów o hierarchicznej strukturze porowatej **34**
- 1.7. Nanostrukturalne kompozyty węglowo-tlenkowe jako katalizatory reakcji elektrochemicznego utlenienia i redukcji nadtlenu wodoru **35**
- 1.8. Badanie własności katalitycznych układów Au-MeO_x/TiO₂ w reakcji utleniania CO **36**
- 1.9. Synteza metalokompleksów salenowych z podstawnikami elektrono-akceptorowymi - badanie wpływu struktury katalizatora na właściwości katalityczne w reakcji utleniania fenolu **37**
- 1.10. Transformacje węglowodorów terpenowych na hierarchicznych katalizatorach zeolitowych: określenie właściwości katalitycznych i fizykochemicznych katalizatorów metodą NMR **38**
- 1.11. Właściwości elektrokatalityczne stopów i kompozytów zawierających metale przejściowe lub metale ziem rzadkich - reakcja jonizacji i wydzielania wodoru **39**
- 1.12. Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów polimerowych **40**
- 1.13. Procesy selektywnego uwodornienia w obecności katalizatorów rutenowych **41**

2. Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria

- 2.1. Właściwości strukturalne i dynamika w epitaksjalnych nanostrukturach metalicznych i tlenkowych badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi **45**
- 2.2. Analiza stanów elektronowych pierwiastków na powierzchniach materiałów aktywnych w heterogenicznych reakcjach chemicznych **46**
- 2.3. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych oraz mechanizmów aktywacji małych cząsteczek: badania kwantowo-chemiczne **47**
- 2.4. Badania nad mechanizmem reakcji katalitycznej dioksygenaz intradiolowych metodami teoretycznymi **48**
- 2.5. Właściwości katalityczne niestechiometrycznych powierzchni V₂O₅ – modelowanie teoretyczne **49**
- 2.6. Centra adsorpcyjne nanocząstek koloidalnych na powierzchniach nanorurek węglowych **50**
- 2.7. Dynamika tworzenia alginianu wapnia - symulacje komputerowe **51**
- 2.8. Badania nad możliwościami selektywnej modyfikacji witaminy B₁₂ - potencjalnego nośnika leków **52**

2.9. Właściwości katalityczne heteropolikwasów typu Keggina i Well-Dawsona, wyznaczone z obliczeń DFT	53
---	----

3. Nanostruktury materii miękkiej

3.1. Opracowanie podstaw fizykochemicznych metody wzmocnienia koloidalnego do wyznaczenia monowarstw białek na powierzchniach elektrolit/ciało stałe	57
3.2. Modelowanie adsorpcji nanocząstek – wieloskalowy opis teoretyczny kinetyki adsorpcji cząstek kulistych na powierzchni jednorodnej	58
3.3. Wpływ ładunku elektrycznego na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni o niskiej hydrofobowości	59
3.4. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe	60

4. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

4.1. Modelowanie odpowiedzi polichromowanych zabytkowych obiektów drewnianych na zmiany warunków środowiska w ich otoczeniu	63
---	----

KRAJOWE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty badawcze własne (MNiSW)

1. N N204 028536 [2009-2012] Opracowanie metody tworzenia biologicznie aktywnych multiwarstw zawierających polielektrolity-białka-dendryty	67
2. N N507 269936 [2009-2012] Nowe nanostrukturalne materiały węglowe, tlenkowe oraz kompozyty węglowo-tlenkowe do budowy superkondensatorów	68
3. N N204 347737 [2009-2012] Teoretyczna i eksperymentalna analiza porowatości wielowarstwowych kulistych cząstek koloidalnych	69
4. N N204 026438 [2010-2013] Nowa metoda ilościowego opisu oddziaływań cząstek koloidalnych oraz białek z granicami faz oparta na pomiarach elektrokinetycznych	70
5. N N204 291238 [2010-2012] Modelowanie teoretyczne kinetyki i równowagi procesów sorpcji jonów metali ciężkich na materiałach pochodzenia biologicznego	71
6. N N204269038 [2010-2013] Biokatalityczna synteza chiralnych alkoholi alkilooaromatycznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenowi - teoria i eksperyment -	72
7. N N204 269238 [2010-2013] Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami	73
8. N N507 616638 [2010-2013] Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych SOFC pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro	74
9. N N204 546439 [2010-2012] Nowe metody dyfraktometrii proszkowej w badaniach faz częściowo uporządkowanych, nanometrycznych oraz materiałów o obniżonej wymiarowości	75
10. N N204 546639 [2010-2013] Stabilność, funkcjonalność i mechanizm tworzenia wielowarstwowych struktur polimerowo-kazeinowych	76
11. N N204 205240 [2011-2014] Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego	77
12. N N204 133640 [2011-2014] Wpływ mikro- i nano-pęcherzyków na powierzchniach hydrofobowych na kinetykę i mechanizm powstawania kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych	78
13. N N204 439640 [2011-2014] Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu reakcji transmetylacji porforyny i jej wybranych pochodnych	79

14. N N204 439040 [2011-2014] Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności	80
15. N N209 757340 [2011-2014] Zastosowanie emulsyfikacji membranowej do produkcji rdzeni nano- i mikrokapsulek	81

Projekty badawcze promotorskie (MNiSW)

1 N N204 179439 [2010-2012] Wpływ surfaktantów kationowych i PpH na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchniach o niskiej hydrofobowości	85
2 N N105 429140 [2011-2012] Odpowiedź strukturalna zapraw z cementów romańskich na wysychanie	86

Projekty badawcze "Sonata" (NCN)

1. HS2 [2011-2014] Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów	89
2. ST5 [2011-2014] Nowe katalizatory Pd-Pt/nanokompozyt hybrydowy do redukcji tlenu w polimerowym ogniwie paliwowym	90
3. ST5 [2011-2014] Funkcjonalizacja filmów polimerowych jako narzędzie do otrzymywania nowoczesnych nanomateriałów o znacznym potencjale aplikacyjnym	91
4. ST4 [2012-2015] Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: modelowanie komputerowe	92
5. ST5 [2012-2017] Wcelowane dostarczanie laków - synteza i funkcjonalizacja nanoosników	93

Projekty badawcze "Opus" (NCN)

1. HS2 [2011-2014] Mechanizm zniszczeń obrazów panelowych z uwzględnieniem struktury przyrostów rocznych drewna i rzeczywistych fluktuacji klimatu	97
2. ST8 [2011-2014] Opracowanie technologii wytwarzania stabilnej i łatwo biodegradowalnej piany ciekłej do zastosowań przemysłowych i biomedycznych	98
3. ST5 [2012-2015] Wpływ gliceryny jako nietoksycznego i biodegradowalnego rozpuszczalnika na mechanizm utleniania fenolu	99
4. ST4 [2012-2014] Monomery tlenków chromu(V), molibdenu (VI) i wolframu (VI) na powierzchni amorficznej krzemionki modyfikowanej glinem. Symulacje periodyczna metodą DFT	100
5. ST4 [2012-2015] Właściwości fizykochemiczne i katalityczne heteropolikwasów modyfikowanych jonami miedzi. Obliczenia teoretyczne vs. eksperyment	101
6. ST4 [2012-2016] Opis mechanizmu oddziaływań surfaktant-polielektrolit w procesie tworzenia nowej generacji nanonosników	102
7. NZ1 [2012-2015] Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne i obliczeniowe	103

Projekty badawcze "Preludium" (NCN)

1. ST4 [2011-...] Modelowanie aktywności katalitycznej nanostruktur biologicznych na przykładzie wybranych dioksygenaz zależnych od żelaza	107
2. ST5 [2012-2013] Wpływ stopnia utlenienia metali nieszlachetnych w układach Au-Me-O/TiO ₂ na oddziaływanie między nanocząstkami złota a nosnikiem	108
3. ST5 [2012-2014] Synteza biogodnych nanoosników dla wybranych substancji neuroprotektynowych	109

Projekty badawcze "Iuventus Plus" (MNiSW)

1. Wybrane aspekty oddziaływań pomiędzy kwasami α -L-gulonowym, β -D-mannuronowym a dwuwartościowymi jonami metali [2012-2013] **113**
2. Nowa metoda syntezy zoli srebra i mechanizm oddziaływania nanocząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy zjawisk elektrokinetycznych oraz metod: AFM, mikroskopii fluorescencyjnej i QCM-D [2012-2014] **114**

Projekty "Mobilność Plus" (MNiSW)

1. Czynniki determinujące stabilność ciekłych filmów powstających w warunkach dynamicznych na powierzchniach ciec-z-gaz i ciec-z-ciało stałe [2011-2012] **117**

Projekty "Homing Plus"(FNP)

1. Struktura i właściwości elektryczne filmów kompozytowych zawierających przewodzące nanocząstki [2010-2012] **121**

Projekty "Pomost"(FNP)

1. Selektywna hydrogenoliza gliceryny do glikoli *via* acetol na katalizatorach heterogenicznych zawierających metale i tlenki metali [2011-2014] **125**

Projekty strategiczne (NCBiR)

1. projektowanie katalizatorów do rekombinacji wodoru i tlenu pod kątem kontroli ich aktywności jako czynnika o krytycznym znaczeniu dla bezpieczeństwa pracy rekombinatorów w instalacjach nuklearnych [2012-2015] **129**
2. Badanie wpływu środków powierzchniowo-czynnych na proces wstępnej hydrolizy celulozy **130**

Projekty "Lider" (NCBiR)

1. Regioselektywne utlenianie pochodnych cholesterolu za pomocą nowego enzymu molibdenowego - dehydrogenazy 25-OH cholesterolowej [2012-2015] **133**

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty 6. Programu Ramowego UE

1. EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt NANOREP II [2008-2012] Multifunctional Surface Coatings and Highly Scratch Resistant Plastic Parts (SPR) **137**

Projekty 7. Programu Ramowego UE

1. EC 7th FP CP-IP 229183-2 NEXT-GTL [2008-2012] Innovative Catalytic Technologies & Materials for Next Gas to Liquid Processes(IP) **141**
2. EC 7th FP MUST [2008-2012] Multi-level protection of materials for vehicles by "smart" nanocontainers (CP) **142**
3. EC 7th FP 226898 ROCARE [2009-2012] ROman Cements for Architectural REstoration to new high standards (CP) **143**
4. 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) **144**

5. EC 7th FP CSA 319054 [2012-2015] NanoIES Nanotechnology Education for Industry and Society (CSA) **145**

Projekty EU COST Action

1. EC COST CM1101 [2011-2015] Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials **149**

Projekty badawcze funduszy strukturalnych UE

1. SPO IG 1.1.2 [2008-2012] MPD Krakow Interdisciplinary Ph.D. Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures **153**
2. PO KL 4.1.1 [2009-2015] ISD Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości **154**
3. PO IG 2.2 [2009-2011] SPINLAB Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do zastosowań w elektronice spinowej **156**
4. PO IG 1.3.1 [2009-2014] BIOTRANSFORMACJE Biotransformacje użyteczne w przemyśle farmaceutycznym i kosmetycznym **157**
5. PO IG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO Funkcjonalne nano- i mikrocząsteczki – synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach **159**
6. PO IG 2.1.1 [2009-2014] VOX Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych do oczyszczania powietrza z toksycznych lotnych związków organicznych **160**
7. PO KL 4.1.1 [2010-2015] ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny **161**

Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. Monowarstwy Fe/W(110): adsorpcja i magnetyzm (w ramach umowy międzyrządowej Polski i Austrii) [2009-2012] **165**
2. Obrazowanie lokalnej kinetyki reakcji katalitycznych dla układów modelowych w skali mezo- i nanoskopowej (w ramach umowy międzyrządowej Polski i Austrii) [2012-2013] **166**
3. Epitaksjalne nanostruktury, metaliczne i tlenkowe, badane przy pomocy jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (w ramach umowy międzyrządowej Polski i Francji) [2010-2012] **167**

INNE ZADANIA

1. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ **171**
2. The formation of amylnantraquinone with palladium-polyaniline-silica catalyst, and the study of the chemistry under deep hydrogenation conditions of the working solution used for the hydrogen peroxide amylnantraquinone process **172**
3. Przeprowadzenie pomiarów grubości warstwy polimerowej techniką spektroskopowej elipsometrii obrazującej oraz analiza struktur termoczulych warstw polimerowych do hodowli komórek **173**
4. Węglowe ogniwa paliwowe z elektrolitem ze stopionych węglanów (DC-MCFC) **174**

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2012

W ROKU 2012:

realizowano:	4 tematy statutowe - 27 zadań badawczych 39 projektów badawczych (grantów) MNiSW, NCBiR, NCN, FNP (w tym 5 promotorskich) 6 projektów programów ramowych Unii Europejskiej (w tym: 1 projekt 6. PR i 5 projektów 7. PR) 1 projekt UE COST Action 3 inne projekty międzynarodowe 78 projektów Funduszy Strukturalnych UE
opublikowano:	1 pracę habilitacyjną ogłoszoną drukiem 4 prace przeglądowe i rozdziały w monografiach 89 prac naukowych drukowanych w czasopismach naukowych o cyrkulacji międzynarodowej (oraz 15 ogłoszonych elektronicznie) 8 prac w innych w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji oraz w pismach popularno-naukowych 3 prace w recenzowanych materiałach konferencyjnych 218 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	3 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wyłożono i zaprezentowano:	88 referatów i komunikatów (w tym 13 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 219 posterów
uzyskano:	3 patenty (w tym 2 za granicą)
we współpracy z zagranicą:	realizowano 23 tematy opublikowano 18 wspólnych prac w czasopismach naukowych (oraz 3 ogłoszone elektronicznie) ogłoszono 36 komunikatów w materiałach konferencyjnych otrzymano 1 patent zrealizowano 138 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę
zorganizowano:	6 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki
stopień doktora habilitowanego:	uzyskały 2 osoby
stopień doktora:	uzyskało 10 osób

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2012

Opracowanie metodyki badań wpływu anizotropii magnetycznej na właściwości układów zawierających nanocząstki magnetyczne oraz analiza zmian konformacyjnych w białku CD44 przy użyciu dynamiki molekularnej

Tomasz Pańczyk, Wojciech Plaziński

Opracowano metodykę sprzężenia klasycznej dynamiki newtonowskiej z procesami rotacji Neela zachodzącymi w układach zawierających nanocząstki superparamagnetyczne. Dzięki temu uzyskano możliwość badań dynamiki przemian strukturalnych w układach zawierających nanocząstki magnetyczne. Ponadto, za pomocą techniki *Umbrella Sampling* wyjaśniono molekularny mechanizm przejść konformacyjnych w transmembranowym receptorze CD44. Zbadano również wpływ reszty Tyr161 na przebieg indukowanego obecnością liganda procesu denaturacji β -kardki nr 9.

Dehydrogenaza etylobenzenowa – biokatalityczna synteza alkoholi chiralnych

Maciej Szaleniec, Agnieszka Dudzik, Mateusz Tataruch, Tomasz Borowski, Małgorzata Witko

Uzyskano szeroką charakterystykę mechanizmu reakcji dehydrogenazy etylobenzenowej metodami eksperymentalnymi (pomiar kinetyczne, chromatograficzna analiza produktów reakcji) oraz teoretycznymi (obliczenia DFT na modelach klasterowych oraz metodą QM:MM dla całej podjednostki enzymu). Wyniki pozwoliły na wyjaśnienie mechanizmu i enancjoselektywności reakcji oraz zaproponowanie alternatywnych ścieżek katalitycznych dla substratów konwertowanych do produktów innych niż drugorzędowe alkohole alkiloaromatyczne o konfiguracji *S*.

Oddziaływanie metal - tlenek w układzie Au-Fe₃O₄

Nika Spiridis, Robert P. Socha, Bartosz Handke, Jerzy Haber, Magdalena Szczepanik, Józef Korecki

Przeanalizowano oddziaływanie złota z tlenkowym nośnikiem dla modelowego katalizatora w postaci nanoklasterów Au osadzonych na Fe₃O₄(001). Zastosowano spektroskopię mössbauerowską elektronów konwersji (CEMS) do bezpośredniej obserwacji powierzchniowej struktury elektronowej nośnika i spektroskopię fotoelektronów (XPS) do określenia stanu złota. Zaobserwowano silną modyfikację struktury elektronowej tlenku wywołaną obecnością Au w obszarze znacznie przekraczającym powierzchnię kontaktu, co wpływa na stopień polaryzacji klasterów złota i jest możliwą przyczyną obserwowanego efektu rozmiarowego w aktywności katalitycznej tego pierwiastka.

Dopuszczalne wahania parametrów klimatycznych w otoczeniu drewna polichromowanego

Łukasz Bratasz, Roman Kozłowski, Leszek Krzemień, Łukasz Lasyk, Michał Łukomski, Bartosz Rachwał, Marcin Strojecki

Zakończono wieloletnie badania nad odpowiedzią drewna polichromowanego na zmiany wilgotności względnej i temperatury. Badania obejmowały adsorpcję i dyfuzję pary wodnej, właściwości mechaniczne materiałów i fizyczne metody śledzenia uszkodzeń. Przeprowadzono analizę czasową odpowiedzi drewnianego podobrazia, uściślono kryterium zagrożenia uszkodzeniami przez analizę odpowiedzi całego wielowarstwowego układu, uwzględniono efekty zmęczeniowe. Wyniki wprowadzono do praktycznej konserwacji poprzez opracowanie norm polskich i europejskich oraz publikację syntetycznego opracowania „Dopuszczalne wahania

mikroklimatyczne dla drewna polichromowanego” w *Studies in Conservation* – czołowym międzynarodowym czasopiśmie poświęconym konserwacji obiektów zabytkowych.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2012:

W roku 2012 zorganizowano 6 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu, stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 19 października 2012

Główną ideą zorganizowania w dniu 19 października 2012, 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:

- A.Bielański "Powstanie i rozpowszechnienie pierwiastków we Wszechświecie"
- T.Borowski "Odrobina chemii w filiżance"
- Ł.Bratasz "Globalne ocieplenie - zabytki w niebezpieczeństwie"
- E.Jarek "Czy białe jest białe i dlaczego widzimy świat w kolorach?"
- M.Szaleniec "Chemia chleba"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Temperatura, ciśnienie i my
- Światło i barwa
- Owocowe baterie
- Szkoła szpiegów
- Kolorowy świat mieszanin
- W kolorowym świecie barwników
- Enzymy i my - czyli jak działają biokatalizatory
- Reakcje chemiczne na codzień
- Krystalizacja a odkrycia Marii Skłodowskiej-Curie
- Mikro i Nano świat widziany w mikroskopie skaningowym
- Konwertery energii
- Reakcja autokatalityczna - rozkład wody utlenionej

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- XLIV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 14-16 marca 2012 (B.Sulikowski)
- 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Anniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Krakow, May 17th-19th, 2012 (R.Kozłowski, W.Łasocha)
- 5th International Workshop Bubble and Drop Interfaces B&S 2012, Krakow, May 20th-24th, 2012 (K.Małyśa, B.Jachimska)

- 3rd International Symposium on Surface Imaging / Spectroscopy at the Solid / Liquid Interface, Krakow, Mat 25th-June 1st, 2012 (P.Nowak)
- 8th International Symposium Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow, August 26th-31st, 2012 (W.Rudziński)
- Sesja Jubileuszowa 100-lecia urodzin Profesora Adama Bielańskiego, Kraków, 14 grudnia 2012 (M.Witko)

Organizacja imprez popularno-naukowych (załączono odpowiednie materiały)

- Festiwal Nauki "Teoria-Poznanie-Doświadczenie", Rynek Główny, Kraków 9-12 maja 2012 (M.Derewiński)
- Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 19 października 2012 (R.Kozłowski)

KRAJOWY NAUKOWY OŚRODEK WIODĄCY

**Krakowskie Konsorcjum Naukowe
im. Mariana Smoluchowskiego
"Materia-energia-przyszłość"**



Krajowy Naukowy Ośrodek Badawczy MNiSW [2012-2017]
(koordynator: prof. Małgorzata Witko)

Instytut otrzymał w lipcu 2012 roku w ramach Krakowskiego Konsorcjum Naukowego im. Mariana Smoluchowskiego "Materia-energia-przyszłość" status Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego KNOW w zakresie nauk fizycznych na okres 2012-2017 nadany przez Ministra Nauki Szkolnictwa Wyższego. Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. Mariana Smoluchowskiego tworzą Wydział Chemii UJ, Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN oraz Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN.

Działania Konsorcjum mają na celu stworzenie unikatowego ośrodka badań interdyscyplinarnych w kluczowych obszarach współczesnej fizyki i chemii, podejmującego ambitne wyzwania naukowe oraz prowadzącego innowacyjne prace rozwojowe i transfer wiedzy na rzecz gospodarki oraz instytucji użyteczności publicznej. Dzięki konsolidacji ogromnego potencjału badawczego opartego o wysokokwalifikowaną kadre czołowych instytucji naukowych Krakowa oraz silnie rozwiniętą infrastrukturę aparaturową, Konsorcjum ma ambicję osiągnięcia statusu organizacji dobrze rozpoznawalnej w świecie naukowym i tworzącej atrakcyjne miejsca pracy i kształcenia dla szczególnie uzdolnionych naukowców polskich i zagranicznych.

Konsorcjum podejmuje działania w dwóch zasadniczych kierunkach: intensyfikacji działalności naukowej partnerów w zakresie wspólnych tematów badawczych oraz organizacji przedsięwzięć wspólnych. Te ostatnie obejmują pracę wspólnego Międzynarodowego Laboratorium zatrudniającego rotacyjnie specjalistów krajowych i zagranicznych oraz powołanie Międzynarodowych Studiów Doktoranckich im. Mariana Smoluchowskiego skoncentrowanych w obszarze badań fizyki i chemii medycznej, fizyki jądrowej i energetyki jądrowej, zaawansowanych materiałów, katalizy i nanotechnologii, fotoniki, spektroskopii i informatyki kwantowej oraz technik konserwatorskich i diagnostyki obiektów zabytkowych. Innymi wspólnymi działaniami są: organizacja Środowiskowego Konwersatorium, na którym będą wykładać lub prowadzić panelowe dyskusje naukowe zaproszeni specjaliści z najlepszych ośrodków naukowych w kraju i zagranicy, oraz dofinansowanie międzynarodowych konferencji naukowych organizowanych pod auspicjami Konsorcjum.

Konsorcjum wspiera prowadzenie wspólnych badań w czterech istniejących centrach będących wizytówką środowiska krakowskiego: Akademickim Centrum Materiałów i Nanotechnologii ACPIN, Centrum Badania Układów w Skali Atomowej ATOMIN, Narodowym Centrum Radioterapii Hadronowej: Centrum Cyklotronowe Bronowice CCB, Narodowym Centrum Promieniowania Synchronotronowego SOLARIS. Planowana jest również konsolidacja rozproszonych do tej pory badań w zakresie ochrony zabytków dziedzictwa kulturowego przez powołanie Centrum HEREDITAS.

Konsorcjum podejmuje również wszechstronne działania na rzecz upowszechniania wyników badań, w celu informowania społeczeństwa o znaczeniu nauk ścisłych dla innowacji, postępu gospodarczego i techniki oraz dla zrównoważonego rozwoju cywilizacji i społeczeństwa.

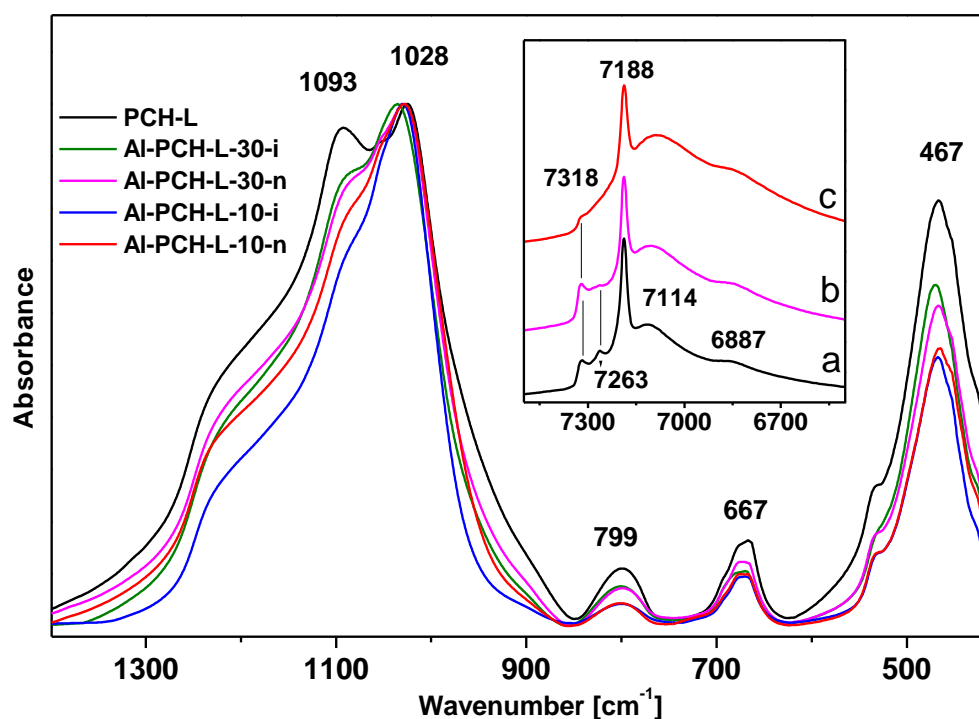
DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1.1. Nanomateriały na osnowie minerałów warstwowych

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

Obiektem badań były aluminowane porowate heterostruktury ilaste typu PCH, otrzymane z wykorzystaniem syntetycznego minerału warstwowego Laponitu (PCH-L). Aluminowanie przeprowadzono metodą posyntezyową, przez impregnację otrzymanego PCH-L azotanem (n) lub izopropanolanem glinu (i), dla wartości Si/Al = 30 i 10. Materiały zostały scharakteryzowane metodami XRD, ICP-OES, XRF, SEM, TG/DTG/DSC, FTIR, MAS NMR. Wykazano, że wiarygodny obraz dystrybucji glinu w obrębie materiału PCH można uzyskać uzupełniając badania MAS NMR rezonansu ^{27}Al i ^{29}Si analizą widm FTIR w zakresie MIR (mid-infrared) i NIR (near-infrared). W zakresie MIR można rozróżnić drgania Si-O charakterystyczne dla krzemianu warstwowego i dla amorficznej krzemionki (Rys. 1). Z kolei w obszarze NIR można obserwować dobrze rozdzielone nadtony drgań grup hydroksylowych w warstwowym krzemianie i grup silanolowych obecnych na powierzchni mezoporowatej krzemionki (Rys. 1, insert). Zmiana wzajemnej intensywności pasm widocznych w MIR i NIR pod wpływem dotowania glinem, odniesiona do zmian obserwowanych w widmach ^{29}Si MAS NMR, pozwala na jednoznaczne wnioskowanie o lokalizacji wbudowanego glinu i jego dystrybucji pomiędzy składniki kompozytu. W szczególności wykazano, że w kompozycie PCH na bazie syntetycznego minerału Laponitu, substytucja glinu dokonuje się wyłącznie w obrębie mezoporowatej krzemionki, natomiast nie obserwuje się wnikania Al do krzemo-tlenowej warstwy tetraedrycznej Laponitu.



Rysunek 1. Widma FTIR w zakresie MIR i NIR: PCH-L („a” w insercie), Al-PCH-L-30-n („b” w insercie), Al-PCH-L-10-n („c” w insercie), Al-PCH-L-30-i, i Al-PCH-L-10-i.

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

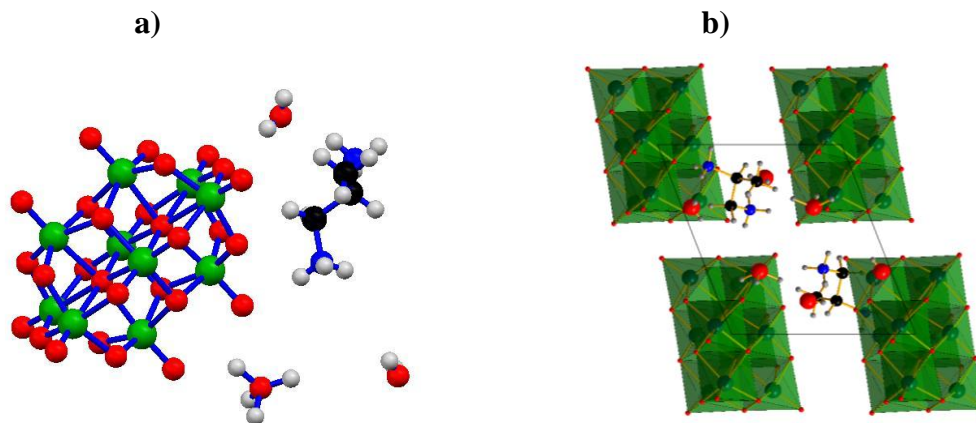
(prof. Wiesław Łasocha, dr Dariusz Mucha, mgr Anna Szymańska, mgr Marta Grzesiak, mgr Katarzyna Luberda-Durnaś)

Prowadzone badania dotyczyły syntezy oraz badań strukturalnych nowych nadtlennych połączeń Mo, W, V oraz nowych polimolibdenianów amin. Dla części uzyskanych połączeń przeprowadzono testy katalitycznego utleniania cykloalkanów.

Badania prowadzone w ostatnim okresie czasu, można w skrócie opisać jako:

- 1) Prowadzono badania strukturalne nowych wanadanów uzyskiwanych w reakcji V_2O_5 z aminami alifatycznymi: 1-aminopropanem (**1-ap**), 1,3-diaminopropanem (**1,3-diap**), 1,2-diaminopropanem (**1,2-diap**). Syntezy prowadzono z środowiska umiarkowanie kwaśnym (pH~3-5) w 30% roztworze H_2O_2 , temperatura reakcji $\sim 0^\circ C$, a krystalizacji 5-10 $^\circ C$.
- 2) Przeprowadzono szereg prób syntezy nowych peroksowanadanów Rb i Cs. W przypadku Rb uzyskano pomarańczowo-żółte kryształy, które stały się przedmiotem badań strukturalnych (rentgenowska dyfrakcja monokryształów), analogiczny związek cezu zbadano metodami XRPD (dyfrakcja proszkowa).
- 3) Dla peroksozwiązków kwasu nikotynowego przeprowadzono testy katalitycznego utleniania cyklooktanu, przy użyciu tlenu z powietrza, wykonywane we współpracy z dr Janem Połowiczem i dr Katarzyną Pamin (IKiFP PAN).
- 4) Dla wybranych polimolibdenianów amin (otrzymywanych i opisywanych w poprzednich latach) przeprowadzono testy katalityczne (utlenienia cyklooktanu).

Poniższy rysunek przedstawia udokładnioną jednostkę asymetryczną (**a**), oraz rzut struktury (**b**) trójskośnego czterowodnego dekanwanadanu 1,2-diaminopropanu. Kule o kolorach zielonym, czerwonym, niebieskim i czarnym oznaczają wanad, tlen, azot i węgiel.



Podsumowując przeprowadzone badania możemy stwierdzić, że:

- a) Wyznaczono struktury krystaliczne 3 nowych dekanwanadnów amin alifatycznych, uzyskano nowe dekanwanadany rubidu i cezu
- b) Stwierdzono wysoką aktywność katalityczną kompleksów peroksomolibdenianowych z kwasem nikotynowym w reakcjach utleniania cyklicznych węglowodorów.
- c) Okazało się, iż dużą aktywność w procesach utleniania przy użyciu tlenu z powietrza wykazują warstwowe oraz polimeryczne związki izopolimolibdenianowe. Ich aktywność katalityczna jest oparta na reakcjach z udziałem wolnych rodników. Najbardziej aktywne katalizatory są w stanie utlenić cyklooktan do ketonu, alkoholu oraz kwasu oktano- dikarboksyłowego (kwas suberynowy).
- d) Aktywności uzyskanych przez nas nowych związków były porównywalne lub wyższe od aktywności komercyjnych katalizatorów stosowanych w podobnych układach w przemyśle.

1.3. Całkowite utlenianie zanieczyszczeń organicznych z zastosowaniem ceramicznych strukturalnych katalizatorów piankowych

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

Celem prowadzonych badań jest synteza i charakterystyka fizykochemiczna ceramicznych katalizatorów piankowych. 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, fazy aktywnej katalizatora oraz przygotowanie mieszaniny pokrywającej szkielet ceramiczny. Jako metodę syntezy pianek ceramicznych wybrano sposób wykorzystujący metodę Schwartzwaldera (US Patent No 3090094), tj. syntezę w oparciu o poliuretanowy szkielet. Przygotowana masa ceramiczna została naniesiona na element pianki poliuretanowej, nadmiar masy ceramicznej został "wypchnięty" z poliuretanowego szkieletu i całość pozostawiono do wysuszenia w temperaturze pokojowej. Kolejnymi etapami było wygrzewanie pianki w podwyższonej temperaturze, wypalanie szkieletu organicznego i spiekanie ceramiki w temperaturze 1150°C. W toku prowadzonych dotychczas badań opracowana została powtarzalna metoda syntezy pianek ceramicznych.

Kolejnym elementem zadania było przygotowanie (m.in. metoda odwróconej mikoemulsji, metoda cytrynianowa) oraz nanoszenie tlenkowej (mieszane tlenki Mn, Cu i Ce) fazy aktywnej. W celu poprawienia własności mechanicznych pianki ceramicznej zdecydowano się na zastosowanie warstwy pośredniej (washcoat), zapewniającej trwałe i równomierne jej związanie i rozproszenie fazy aktywnej.



Rysunek 1. Pianka poliuretanowa, pianka ceramiczna po spiekaniu, katalizator piankowy (od lewej do prawej)

Preparaty scharakteryzowane zostały pod względem fizykochemicznym: dyfraktometria proszkowa XRD, mikroskopia skaningowa SEM, sonda EDS w celu analizy składu powierzchni preparatu; jak i katalitycznym. Testy katalityczne przeprowadzono w reaktorze przepływowym systemu PID sprzężonym z chromatografem gazowym. strumień powietrza stężenie toluenu ustalano na poziomie 2g/m³.

Testy katalityczne (fazy aktywnej w formie proszku oraz naniesionej na szkielet pianki ceramicznej) przeprowadzono przy obciążeniu katalizatora wynoszącym GHSV= 10000 h⁻¹ i w zakresie temperatur 100-700°C. Wyższą aktywności katalityczną wykazały się tlenki z udziałem fazy CeO_x.

1.4. Procesy fotokatalitycznej degradacji zanieczyszczeń organicznych w wodzie z równoczesnym zastosowaniem utleniacza - efekty synergiczne

(prof. Piotr Warszyński, dr hab. Paweł Nowak prof IKiFP)

W związku z zaostrzającymi się wymogami odnośnie jakości wód przeznaczonych na cele bytowo-gospodarcze zachodzi konieczność opracowywania coraz to nowszych technologii oczyszczania wody. W tym projekcie główny nacisk położony został na zbadanie synergicznego efektu zachodzącego poprzez połączenie kilku metod, m.in. procesu fotokatalitycznego utleniania na powierzchni półprzewodnika oraz chemicznego utleniania za pomocą substancji aktywnych, co w konsekwencji doprowadzi do poprawy efektywności usuwania naturalnych substancji organicznych (NSO) z wód, przewyższającej w znacznym stopniu skuteczność osiąganą stosowanymi dotychczas metodami tradycyjnymi (filtracja, koagulacja).

Badano rozkład modelowych związków organicznych (kwasy humusowe, błękit metylenowy, rodamina B) w układzie, który bazuje na kompilacji oddziaływania katalizatora aktywowanego promieniowaniem UV oraz silnego czynnika utleniającego, który wprowadzano do układu fotokatalitycznego na dwa sposoby: dozowanie ciągle oraz aplikacja nieorganicznych nośników z substancją utleniającą. Spośród kilku zsyntezowanych kapsulek z substancją utleniającą i przebadaniu ich pod kontem uwalniania czynnika aktywnego (przepuszczalności powłok), stabilności, aktywności wybrano najlepsze, biorąc ponadto pod uwagę kryterium prostoty syntezy i inertności dla środowiska wodnego użytych do syntezy matryc. Wosk oraz polidimetylosiloksan (PDMS) wykazały najlepsze właściwości jako materiały do enkapsulacji czynnika aktywnego. Detekcję rozkładu związków organicznych prowadzono przy zastosowaniu spektrofotometrii z zakresu UV – VIS przy odpowiedniej dla danej substancji analitycznej długości fali oraz porównano z parametrem ChZT-Mn i OWO - Ogólny Węgiel Organiczny (ang. TOC). Przeprowadzono także pomiary spektrofluorymetryczne.

W wyniku równoczesnego zastosowania katalizatora (TiO_2) i czynnika utleniającego – nadsiarczanu sodu zaobserwowano wysoką konwersję związków organicznych, znacznie przewyższającą zastosowane osobno katalizator czy utleniacz w tych samych warunkach. Stwierdzono występowanie efektu synergicznego w przypadku równoczesnego stosowania TiO_2 i $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$, co potwierdzają zarówno pomiary spektrofotometryczne, jak i parametr ChZT-Mn. (przykładowe wyniki dla kwasów humusowych zebrano w tabeli 1). Wstępna analiza metodą TOC wykazała, że nie udało się osiągnąć całkowitej mineralizacji kwasu humusowego.

Tabela 1. Synergiczne działanie TiO_2 i nadsiarczanu sodu w procesie rozkładu kwasów humusowych.

COD=ChZT-Mn (Chemiczne Zapotrzebowanie Tlenu metodą nadmanganianową), A_{254} - wartości absorbancji dla kwasów humusowych przy analitycznej długości fali 254 nm.

Composition of UV investigated solution	40 mg l ⁻¹ HA + 1x10 ⁻³ mol l ⁻¹ Na ₂ S ₂ O ₈		40 mg l ⁻¹ HA + 100 mg l ⁻¹ TiO ₂ Degussa		40 mg l ⁻¹ HA + 1x10 ⁻³ mol l ⁻¹ Na ₂ S ₂ O ₈ + 100 mg l ⁻¹ TiO ₂ Degussa	
	COD	A ₂₅₄	COD	A ₂₅₄	COD	A ₂₅₄
Degradation rate (%)	21.1	23.6	21.3	46.1	63.2	90.0

1.5. Fizykochemia układów: heteropolikwas – materiał mezoporowaty typu MOF

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

Podjęte badania mają na celu zbadanie właściwości fizykochemicznych i na tej podstawie określenie możliwości zastosowania materiałów mezoporowatych typu MOF w syntezie katalizatorów oraz sorbentów. Materiały mezoporowate posiadające regularne klatki i duże kanały mogą być stosowane zarówno w katalizie, jak i w rektyfikacji, biotechnologii i do magazynowania gazów. Wprowadzenie anionów heteropolikwasu typu Keggina do różnych nanomateriałów porowatych takich jak krzemionka, zeolity typu MCM i SBA poprawia właściwości katalityczne tych nośników poprzez modyfikację ich powierzchni właściwej. W naszych badaniach wybraliśmy kombinację heteropolikwasu dodekawolframo-fosforowego $H_3PW_{12}O_{40}$ (HPW) z materiałem MOF, nazywanym w skrócie Fe(BTC), gdzie BTC oznacza łącznik organiczny kwasu 1,3,5-benzenotrikarboksylowego. Użyty heteropolikwas HPW należy do najbardziej kwaśnych heteropolikwasów. Nowy, stały, kwaśny katalizator HPW-Fe(BTC) wydaje się być potencjalnym kandydatem do zastosowania w konwersji alkoholu, w której istotna jest zarówno obecność mocnych centrów kwasowych jak i duża powierzchnia właściwa nośnika typu MOF.

Katalizatory sporządzono stosując MOF o nazwie handlowej "Basolite™ F300" i wzorze $C_9H_3FeO_6$ firmy Sigma-Aldrich oraz heteropolikwas typu Keggina $H_3PW_{12}O_{40} \cdot nH_2O$ firmy Aldrich. Objętość użytego do syntezy katalizatorów heteropolikwasu odpowiadała 15-80 % objętościowych porów w materiale MOF. Widma FTIR poszczególnych katalizatorów zostały porównane z widmami F300 i czystego HPW. Dla heteropolikwasu naniesionego na materiał MOF nie zaobserwowano żadnych zmian w zakresie częstotliwości jego drgań strukturalnych. Oznacza to, że heteropolikwas został wprowadzony do struktury MOF w niezmienionej formie. Równocześnie przebieg widm IR wskazuje na obecność w katalizatorach łączników organicznych pochodzących od F300. Do testów katalitycznych użyto przepływowy reaktor różniczkowy. Każda z naważka katalizatora zawierała taką samą ilość bezwodnego HPW (0.025 g). Jako reakcję testową wybrano katalityczną konwersję alkoholu etylowego. Testy katalityczne wykonano w zakresie temperatur 90 – 200 °C, stosując jako katalizatory: HPW(n)F300 (n oznacza %objętościowy HPW w porach F300), F300 i HPW. Zaobserwowano dwa produkty odwadniania etanolu: dietylowy eter (DEE) i etylen (C_2H_4). Czysty F300 nie wykazał aktywności katalitycznej, w przeciwieństwie do katalizatorów nośnikowych na F300. Oba produkty reakcji zarejestrowano równocześnie w temperaturze reakcji powyżej 110°C.

Reasumując całość badań fizykochemicznych zsyntezowanych katalizatorów, stwierdzono, że, obecność jako nośnika materiału F300 zwiększyła w porównaniu z czystym HPW jego pojemność sorpcyjną na etanol. Katalizatory po cyklu sorpcyjno-desorpcyjnym etanolu wykazały obecność etanolu w postaci jonów etoksoniowych jak i fizysorbowanych. Wykazano wpływ lokalizacji HPW, na zewnętrznej jak i wewnętrznej powierzchni MOF, na selektywność w konwersji etanolu. Właśnie lokalizacja HPW jest odpowiedzialna za występowanie dwóch temperatur reakcji odpowiadających maksimum wydajności dietylowego eteru. Przy niskiej zawartości HPW w katalizatorze, występuje on głównie we wnętrzu struktury MOF, co odpowiada maksimum wydajności do eteru w wyższych temperaturach. Podczas gdy dla katalizatorów o wysokiej zawartości HPW, w których heteropolikwas jest usytuowany na zewnętrznej powierzchni MOF, reakcja przebiega identycznie jak dla czystego HPW - fakt ten odpowiada maksimum wydajności tworzenia eteru w niskich temperaturach.

Preparaty zsyntetyzowane w naszym laboratorium, zawierające jako nośnik materiał typu MOF, mogą posłużyć jako adsorbenty, sita molekularne czy jako kwasowe katalizatory.

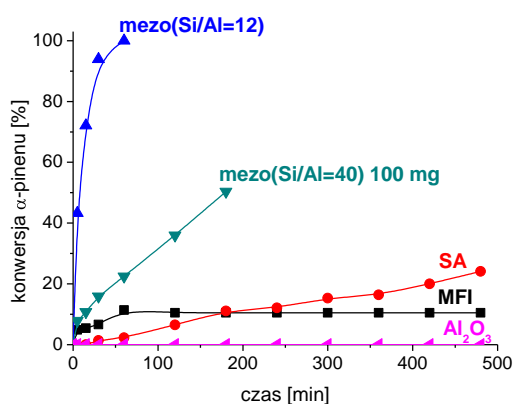
1.6. Wykorzystanie nanocząstek sit molekularnych w syntezie materiałów o hierarchicznej strukturze porowatej

(dr hab. inż. Mirosław Derewiński, prof. IKiFP, mgr Katarzyna Onik, mgr Jerzy Podobiński)

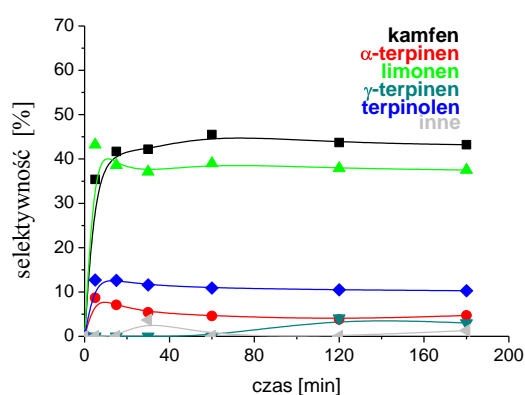
Mikroporowate sita molekularne (zeolity) są szeroko wykorzystywane jako katalizatory kwasowo-zasadowe oraz aktywne nośniki katalizatorów bifunkcyjnych. Z drugiej strony, niewielkie rozmiary kanałów obecnych w kryształach zeolitów mogą być przyczyną występowania przeszkód sterycznych utrudniających transport cząsteczek substratów/produktów lub eliminujących powstawanie aktywnych kompleksów pośrednich warunkujących przebieg reakcji. Tego typu ograniczenia są powodem zmniejszonego wykorzystania zeolitów jako katalizatorów, szczególnie w przypadku reakcji prowadzonych w łagodnych warunkach, np. w fazie ciekłej. Jednym z efektywnych sposobów zmniejszenia ograniczeń dyfuzyjnych jest zastosowanie, jako fazy aktywnej, nanocząstek zeolitów o wielkości poniżej 10nm (tzw. prekursorzy zeolitowe, cząstki protozeolityczne)

Celem podjętych badań było wykorzystanie nanocząstek zeolitu typu MFI w preparatyce materiałów o otwartej, hierarchicznej strukturze porowatej. Opracowano warunki preparatyki materiałów mezoporowatych (ozn. *mezo* ($Si/Al=x$)), w których fazę aktywną stanowią cząstki protozeolityczne zeolitu typu MFI rozproszone w cienkich (~40 nm) warstwach krzemianowych. Lamelarne struktury mezoporowate otrzymano w wyniku przestrzennego usieciowania koloidalnych zawiesin nanocząstek (o wielkości ok. 5 nm) w obecności heksadecyloaminy (HDA) jako surfaktanta. Badania SEM i TEM pozwoliły na określenie warstwowej budowy otrzymanych preparatów. Opracowano warunki termicznej eliminacji organicznych szablonów zaokludowanych w strukturze powstałych materiałów, zapewniające generowanie protonowych centrów aktywnych. Pomiary ^{27}Al MAS NMR potwierdziły tetraedyczną koordynację strukturalnych atomów Al, a badania sorpcji pirydyny (FTIR) pozwoliły na zdefiniowanie natury, ilości i mocy centrów aktywnych. Otrzymane na bazie nanoklasterów zeolitu MFI materiały wykorzystano jako katalizatory izomeryzacji α -pinenu w fazie ciekłej (temp.<100°C). Testy katalityczne wykazały wysoką aktywność nowych materiałów, znacznie przewyższającą zarówno aktywność standardowego zeolitu MFI, materiałów mezoporowatych typu Al-SBA-15 jak i amorficznych glinokrzemianów (Rys. 1). Głównymi produktami reakcji są kamfen (50-45%) oraz limonen (40-35%) (Rys. 2).

Uzyskane wyniki wskazują na nowy obszar zastosowania katalizatorów na bazie zeolitów, tj. jako katalizatory reakcji prowadzonych w fazie ciekłej.



Rysunek 1. Konwersja α -pinenu: *mezo* ($Si/Al=x$) – nowe materiały hierarchiczne, SA – glinokrzemian amorficzny ($Si/Al=7$), MFI – standardowy zeolit ($Si/Al=40$). Temp. reakcji 75°C, 5 ml α -pinenu, $m_{kati}= 250$ mg



Rysunek 2. Selektywność do produktów przemiany α -pinenu prowadzonej wobec katalizatora *mezo* ($Si/Al=40$). Temp. reakcji 75°C, 5 ml α -pinenu, $m_{kati}= 100$ mg

1.7. Nanostrukturalne kompozyty węglowo-tlenkowe jako katalizatory reakcji elektrochemicznego utlenienia i redukcji nadtlenu wodoru

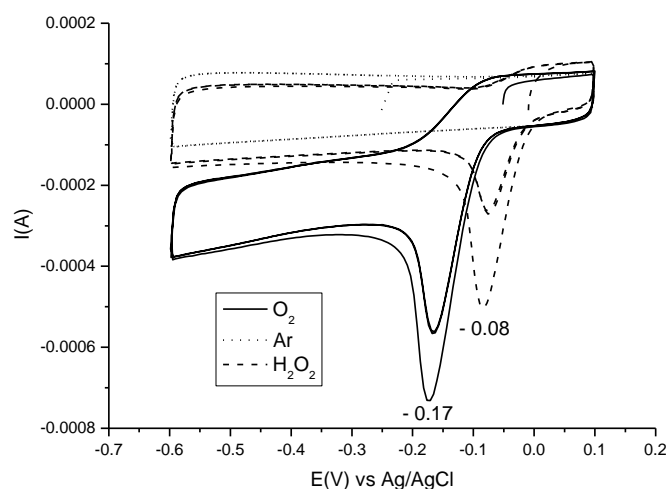
(dr hab. inż. Paweł Nowak prof IKiFP, dr inż. Aleksandra Pacuła)

Jako substratu reakcji anodowej (paliwa) w ogniwie paliwowym można używać rozmaitych substancji, począwszy od wodoru a na stałym węglu kończąc. Natomiast w przypadku reakcji katodowej praktyczne znaczenie ma tylko jeden utleniacz – tlen atmosferyczny. Reakcja redukcji ditlenu może przebiegać jako reakcja 4 elektronowa (produktem jest woda) lub jako reakcja dwuelektronowa (produktem jest wtedy nadtlenek wodoru). W tym drugim przypadku nie tylko ilość energii elektrycznej możliwej do otrzymania z ogniwa jest znacznie mniejsza, ale też następuje nagromadzenie się nadtlenu wodoru w ogniwie, co ma negatywny wpływ na pracę ogniwa. W związku z tym katalizator reakcji katodowej w ogniwie paliwowym powinien być nie tylko dobrym katalizatorem reakcji redukcji tlenu, ale również reakcji redukcji nadtlenu wodoru.

Od kilku lat w Instytucie prowadzone są badania nad syntezą nanostrukturalnych materiałów węglowo-tlenkowych, które mogłyby znaleźć zastosowanie, między innymi, jako katalizatory reakcji redukcji ditlenu w ogniwach paliwowych. Wykazano ich dużą aktywność katalityczną w tej reakcji – brak było natomiast informacji na temat ich aktywności w reakcji redukcji/utlenienia nadtlenu wodoru.

Do pomiarów wybrano kompozyty zawierające metaliczny kobalt, tlenki kobaltu i glinu oraz nanorurki węglowe, które otrzymano w temperaturach 600, 700 i 800°C w wyniku termicznego rozkładu acetonitrylu i kobaltowo-glinowych materiałów o strukturze hydrotalkitu i różnym stosunku atomowym, Co/Al = 2 i 3. Nadmiar materiału tlenkowego usuwano ługując otrzymane preparaty roztworem HCl. Pomiarów elektrochemicznych prowadzono metodą woltamperometrii cyklicznej, stosując różne szybkości zmiany potencjału (100, 50, 20, 10 i 5 mV/s), w środowisku zasadowym i kwaśnym w roztworach nasyconych ditlenem oraz w roztworach nadtlenu wodoru o takim samym stężeniu jak stężenie tlenu w roztworze nasyconym. Elektrode badaną stanowiła elektroda z węgla szklanego z naniesioną warstwą badanego kompozytu.

W roztworze alkalicznym nadtlenek wodoru ulega redukcji przy potencjale znacznie niższym niż tlen (60-90 mV, w zależności od temperatury syntezy preparatu i stosunku Co/Al), co oznacza, że przy potencjale odpowiadającym redukcji tlenu nadtlenek wodoru powinien ulegać całkowitej redukcji a badane materiały nadają się na katalizator w ogniwie paliwowym z elektrolitem alkalicznym (patrz Rys. 1). W środowisku kwaśnym nadtlenek wodoru ulegał



redukcji przy potencjale zbliżonym do potencjału redukcji tlenu, co oznacza, że nadtlenek wodoru może ulegać nagromadzeniu w elektrolicie w trakcie pracy ogniwa. Katalizatory te nie nadają się do pracy w ogniwie paliwowym, w którym zastosowano elektrolit o niskim pH.

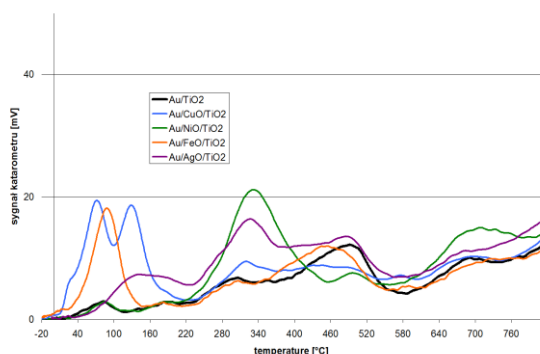
Rysunek 1. Woltamperogramy zarejestrowane w 0,1 M KOH (10 mV/s) w obecności kompozytu (600 °C, Co/Al = 2) naniesionego na elektrodę węglową (GC) w roztworze pozbawionym tlenu przez przedmuchiwanie argonem, w roztworze nasyconym tlenem i w roztworze zawierającym nadtlenek wodoru o stężeniu takim samym jak stężenie tlenu w roztworze nasyconym.

1.8. Badanie własności katalitycznych układów Au-MeO_x/TiO₂ w reakcji utleniania CO oraz ich własności redukcyjnych.

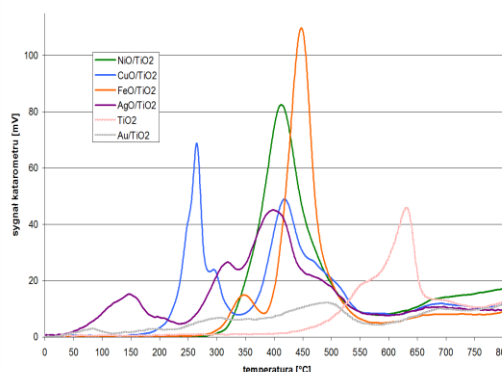
(dr hab. Ryszard Grabowski prof IKiFP, mgr Jan Mizera, dr Katarzyna Samson, dr Małgorzata Rugierro, mgr Michał Śliwa)

Celem badań było określenie właściwości redukcyjnych oraz katalitycznych układów Au-MeO_x/TiO₂ w reakcji utleniania CO. Badania prowadzone w ostatnich latach wykazały, że nośnik w katalizatorach Au/tlenek metalu spełnia rolę materiału, którego specyficzne właściwości, a szczególności redukowalność, mogą wpływać na właściwości nanocząstek złota, takie jak ich rozmiar czy stan elektronowy. Łatwo redukowalne nośniki generują również więcej wakancji tlenowych na granicy nanocząstka Au-nośnik tlenkowy, która jest uważana za centrum aktywacji tlenu w reakcjach utleniania. Z tego wynika też, że zasobność nośnika tlenkowego w powierzchniowe mobilne formy tlenu ma istotny wpływ na aktywność katalityczną.

Badania TPR H₂ katalizatorów Au/MO_x/TiO₂ oraz samych domieszkowanych nośników (MO_x/TiO₂) pokazały, że wprowadzenie tlenków prowadzi do zmian w profilach redukcji TPR oraz modyfikuje ich właściwości katalityczne. Równocześnie stwierdzono, że ilość skonsumowanego wodoru w reakcji redukcji katalizatorów jest o ponad 40% niższa niż w przypadku samych nośników. By wyjaśnić różnicę w konsumpcji wodoru wykonano serię eksperymentów mających pokazać, który z czynników pojawiających się w trakcie nanoszenia nanocząstek złota metodą osadzanie - strącanie wywołuje wspomniane obniżenie konsumpcji wodoru.



Profile TPR katalizatorów Au/MO_x/TiO₂

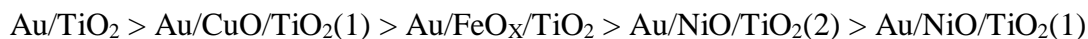


Profile TPR nośników MO_x/TiO₂

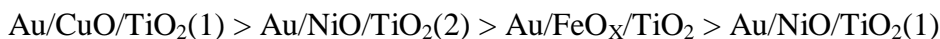
Aktywności katalityczne świeżych katalizatorów, otrzymanych przez nanoszenie sekwencyjne, mierzone w 35°C, mają zbliżone wartości (konwersja CO w granicach 80%). Ich aktywność maleje w szeregu:



Aktywności we wszystkich temperaturach reakcji po procesie traktowania wodorem przedstawia poniższy szereg:



Ponowne utlenienie preparatów nie przywraca początkowej aktywności, jednak w każdym przypadku aktywność po reutlenianiu jest wyższa niż po procesie traktowania wodorem, co może świadczyć o tym, że redukcja powoduje nieodwracalną zmianę powierzchni. Szereg ilustrujący aktywności po procesie reutlenienia przedstawia się następująco:



Uzyskane wyniki pozwoliły na określenie wpływu poszczególnych domieszek tlenkowych na aktywność mieszanych katalizatorów złoto-tlenek/TiO₂ w reakcjach utleniania.

1.9. Synteza metalokompleksów salenowych z podstawnikami elektronoakceptorowymi - badanie wpływu struktury katalizatora na właściwości katalityczne w reakcji utleniania fenolu

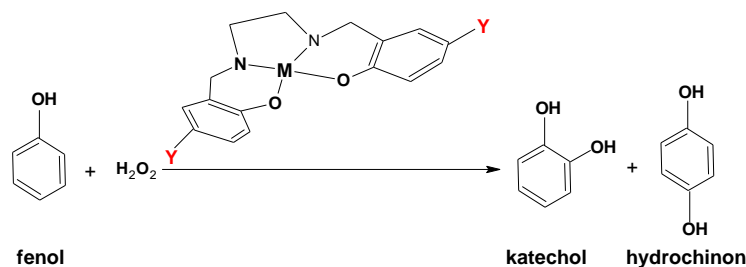
(dr Katarzyna Pamin, dr Jan Poltowicz, mgr Robert Karcz)

Fenole – związki alochtoniczne należą do zanieczyszczeń najczęściej występujących w środowisku naturalnym. Związki te są wysoce toksyczne, trwałe i znalezienie chemicznego procesu do ich rozkładu jest sprawą priorytetową.

Usuwanie związków z grupy fenoli może być realizowane na drodze katalitycznego utleniania. W reakcjach tych wykorzystuje się makrocykliczne kompleksy, takie jak metalosaleny, które znane są już od dawna jako aktywne i selektywne katalizatory procesów utleniania związków organicznych.

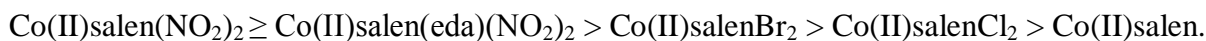
W niniejszej pracy przedstawiono wyniki katalitycznego utleniania fenolu za pomocą wody utlenionej jako utleniacza, katalizowanego kompleksami metalosalenowymi z podstawnikami elektrono-donorowymi na drugim stopniu utlenienia: Co(II)salen, Co(II)salenCl₂, Co(II)salenBr₂, Co(II)salen(NO₂)₂ i Co(II)salen(eda)(NO₂)₂ oraz na trzecim stopniu utlenienia z ligandem aksjalnym: OAcCo(III)salen, OAcCo(III)salen-Cl₂, OAcCo(III)salenBr₂ i OAcCo(III)salen(NO₂)₂ i OAcCo(III)salen(eda)(NO₂)₂,

Produktami reakcji utleniania fenolu są katechol oraz hydrochinon.

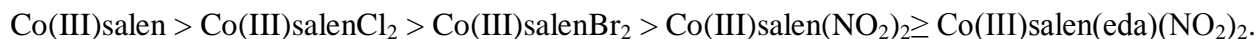


Rysunek 1. Utlenianie fenolu z wodą utlenioną

Uzyskane wyniki testów katalitycznych pokazały, że wszystkie zsyntetyzowane kompleksy metalosalenowe są aktywnymi katalizatorami reakcji utleniania fenolu w obecności nadtlenu wodoru jako utleniacza. Wszystkie kompleksy wykazują dobrą selektywność do dwufenoli jako produktów. Stwierdzono, że aktywność katalityczna badanych makrocyklicznych kompleksów zależy od struktury ligandu i elektroujemności podstawników. W przypadku kompleksów salenowych Co(II) ich aktywność wzrasta wraz ze wzrostem elektroujemności ligandu. Najbardziej aktywne były kompleksy z podstawnikami nitrowymi, czyli z podstawnikami najbardziej elektroujemnymi. Wprowadzenie podstawników elektronoakceptorowych powoduje wzrost konwersji fenolu i selektywności do katecholu. Dla kompleksów salenowych Co(II) otrzymano następujący szereg aktywności katalitycznej:



Dla kompleksów salenowych Co(III) otrzymano następujący szereg aktywności katalitycznej:



W tym wypadku, wprowadzenie podstawników elektronoakceptorowych do kompleksu salenowego powoduje zmniejszenie jego aktywności katalitycznej i prowadzi do spadku konwersji fenolu oraz do wzrostu selektywności do hydrochinonu. Nasze wyniki pokazują, że zarówno kompleksy salenowe Co(II) jak i kompleksy salenowe Co(III) z ligandem aksjalnym są aktywne w procesie hydroksylacji fenolu z wodą utlenioną a ich aktywność katalityczna zależy od własności elektronoakceptorowych podstawników.

1.10. Transformacje węglowodorów terpenowych na hierarchicznych katalizatorach zeolitowych: określenie właściwości katalitycznych i fizykochemicznych katalizatorów metodą NMR

(prof. Bogdan Sulikowski, dr Ewa Włoch)

W ostatnich kilkunastu latach w technologii organicznej zaznacza się wyraźnie tendencja do stosowania coraz wydajniejszych procesów katalitycznych, a równocześnie obserwuje się przechodzenie do procesów zachodzących w fazie ciekłej. W chemii terpenów istotnym surowcem naturalnym jest α -pinen, znajdujący się w terpentynie siarczanowej. Węglowodór ten, należący do grupy monoterenów, wykorzystuje się do syntezy cennych półproduktów przemysłu farmaceutycznego i kosmetycznego, a mianowicie kamfenu, limonenu i *p*-cymenu. Izomeryzacja α -pinenu jest ważnym procesem przemysłowym, prowadzonym klasycznie na uwodnionym dwutlenku tytanu. Katalizator ten wykazuje jednak m.in. niską aktywność i dlatego podjęto badania mające na celu zastąpienie go innymi, bardziej wydajnymi kontaktami mikro- i mezoporowatymi.

Zeolity syntetyczne, z uwagi na obecność centrów kwasowych Brønsteda i Lewisa, są bardzo dobrymi materiałami do syntezy nowych katalizatorów transformacji terpenów. Do badań wykorzystano zeolit typu Y, który modyfikowano za pomocą środków chelatujących, m.in. przy użyciu kwasów organicznych H_4EDTA , $(COOH)_2$ itp. W odpowiednio dobranych warunkach eksperymentalnych usunięto z preparatów część glinu sieciowego, otrzymując materiały hierarchiczne o bimodalnym systemie porów. Materiały wykonane na podstawie zeolitu Y standaryzowano, po czym wykonano dla nich pomiary XRD, sorpcji azotu, drgań szkieletowych zeolitu metodą FT IR. Dla wybranych próbek wykonano widma NMR dla jąder krzemu i glinu za pomocą spektrometru Brukera 500 MHz w polu 11,7 T, stosując odpowiednie sondy do ciała stałego. Jak wykazały wcześniejsze badania, aktywność i selektywność kontaktów zeolitowych w reakcji transformacji α -pinenu zależy m.in. od ilości glinu znajdującego się nie tylko w pozycjach sieciowych, lecz także pozasieciowych. Dlatego w oparciu o ilościową analizę widm NMR ustalono skład sieci glinokrzemianowej oraz dystrybucję glinu pomiędzy pozycje sieciowe i pozasieciowe preparatów zeolitowych. Analiza danych katalitycznych dotycząca zarówno badanych zeolitów, jak również glinokrzemianów o innej strukturze, pozwoli na otrzymanie zależności pomiędzy strukturą zeolitu, składem sieci glinokrzemianowej (Si/Al), dystrybucją glinu, obecnością centrów aktywnych, obecnością mikro- i mezoporów a przebiegiem procesu izomeryzacji α -pinenu w fazie ciekłej.

W okresie sprawozdawczym wykonano ponadto badania strukturalne metodą NMR dla nowych materiałów o interesujących właściwościach katalitycznych, czyli dla tzw. mezoporowatych pian komórkowych.

Wyniki naszych prac mogą znaleźć w przyszłości zastosowanie przy doborze, modyfikacji i produkcji przemysłowych katalizatorów transformacji węglowodorów terpenowych w fazie ciekłej.

1.11. Właściwości elektrokatalityczne stopów i kompozytów zawierających metale przejściowe lub metale ziem rzadkich - reakcja jonizacji i wydzielania wodoru

(dr hab. inż. Paweł Nowak prof. IKiFP, dr inż. Grzegorz Mordarski)

Reakcja wydzielania wodoru (RWW) z wody na drodze elektrolizy jest jedną z najważniejszych reakcji elektrochemicznych. Doskonałym materiałem katodowym, wykazującym bardzo wysoką aktywność katalityczną w tej reakcji jest platyna (a także niektóre inne metale szlachetne, na przykład pallad). W obecnej chwili platyna jest materiałem drogim i deficytowym, w związku z czym w całym świecie trwają intensywne prace mające na celu znalezienie materiałów, które mogłyby ją zastąpić.

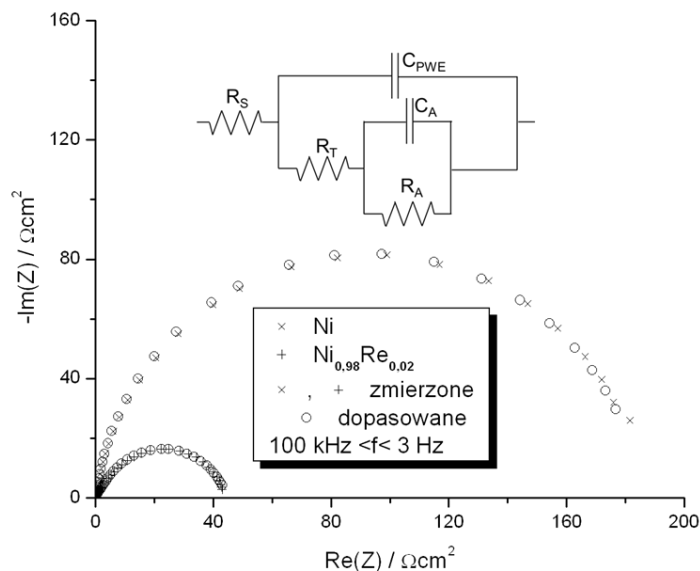
W swoich badaniach nad otrzymaniem takich materiałów zwróciliśmy uwagę na ren. W literaturze znaleźć można doniesienia o wysokiej aktywności renu w RWW a Polska jest jednym z największych producentów renu w świecie i polski przemysł jest zainteresowany rozszerzeniem obszaru zastosowań renu. W swoich poprzednich badaniach potwierdziliśmy wysoką aktywność katalityczną stopów renu z kobaltem w RWW. W roku 2012 badaliśmy stopy i kompozyty zawierające obok renu: nikiel, tytan a także tlenek tytanu.

Stopy renu z niklem otrzymywaliśmy na drodze elektrolizy roztworów zawierających rozpuszczone sole obu metali. Przez elektrolizę zawieszin drobnych ziaren tytanu i tlenku tytanu w tych roztworach otrzymywaliśmy materiały kompozytowe zawierające ziarna wymienionych substancji rozproszone w osnowie ze stopu Ni-Re. Otrzymane stopy i kompozyty poddawano obróbce termicznej w atmosferze gazów o różnym składzie. Skład fazowy stopów i kompozytów badano metodą dyfrakcji rentgenowskiej a skład chemiczny metodą fluorescencji rentgenowskiej oraz metodą optycznej spektroskopii emisyjnej z indukcyjnie sprzężoną plazmą (po uprzednim rozтворzeniu). Kinetykę RWW badano metodą krzywych polaryzacyjnych oraz metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej.

Aktywność katalityczna materiału zależy przede wszystkim od dwóch czynników: aktywności właściwej i stopnia rozwinięcia powierzchni. Celem pracy było stwierdzenie czy dodatek renu do niklu i kompozytów otrzymanych na osnowie niklu podniesie ich właściwą aktywność katalityczną. W związku z tym badano materiały o niskim i powtarzalnym stopniu rozwinięcia powierzchni, co pozwalało na porównanie ich aktywności właściwej.

Stwierdzono, że wszystkie badane materiały zawierające ren odznaczały się wysoką aktywnością katalityczną w RWW. Na rysunku poniżej pokazano widma impedancyjne wykonane na elektrodach z niklu i stopu Ni-Re o zawartości 2% atomowe Re w roztworze KOH o stężeniu

6 mol dm⁻³ (jest to roztwór używany w praktyce). Jak widać już tak niewielki dodatek renu powoduje bardzo znaczące obniżenie oporności polaryzacyjnej elektrody, co jest równoważne odpowiedniemu zwiększeniu szybkości RWW.



Rysunek 1. Widma impedancyjne wykonane na elektrodach z niklu i stopu niklu z renem w roztworze KOH o stężeniu 6 mol dm⁻³ przy potencjale -1,2 V względem elektrody Hg/HgO/NaOH 1 mol dm⁻³. Na rysunku pokazano również elektryczny układ zastępczy stosowany w interpretacji wyników.

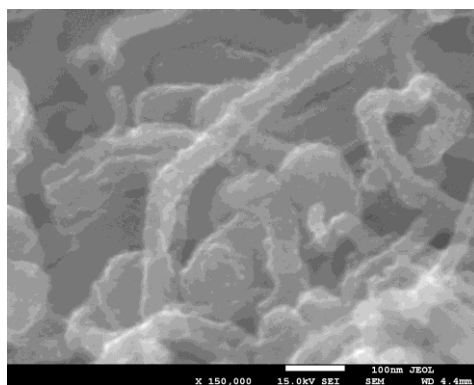
1.12. Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów polimerowych

(dr hab. Alicja Drelinkiewicz prof IKiFP, mgr inż. Żaneta Kalemba-Jaje, dr Erwin Lalik)

W reakcji transestryfikacji triglicerydów metanolem tworzone są bio-estry, Biodiesel. Ze względu na ekologiczne, technologiczne i ekonomiczne czynniki, prowadzone są intensywne badania nad opracowaniem stałych katalizatorów, celem zastąpienia stosowanych obecnie katalizatorów homogenicznych. Prowadzone badania koncentrują się głównie na doborze katalizatorów kwasowych, gdyż są one aktywne zarówno w transestryfikacji triglicerydów, jak i w estryfikacji kwasów tłuszczowych występujących w olejach.

W obecnym projekcie jako stałe katalizatory kwasowe zastosowano preparaty polimerowe w których polianilina sprotonowana kwasem siarkowym (PANI-S) (10-20 wt %) osadzona była na trzech różnych nośnikach, węgla, krzemionce i nanorurkach węglowych (CNT). Polymer osadzony był w trakcie polimeryzacji aniliny prowadzonej w obecności nośników. Katalizatory te badano w reakcji metanolizy triacetinu i oleju rycynowego oraz w estryfikacji kwasu rycynowego. Właściwości teksturalne i kwasowe tych katalizatorów charakteryzowano metodami FT-IR, XRD, sorpcją amoniaku i mikroskopią elektronową. Zastosowane nośniki różniły się zasadniczo powierzchnią właściwą i strukturą porowatą a przede wszystkim właściwościami hydrofobowymi powierzchni. Skutkowało to dużymi różnicami w morfologii warstwy polimerowej osadzonej na tych nośnikach. Równomierne pokrycie dające polimer o najlepiej rozwiniętej morfologii obserwowano dla CNT nośnika (Rys. 1). Morfologia polimeru na powierzchni pozostałych nośnikach, węgla i krzemionce była inna, gdyż obecne były zagregowane struktury złożone z nanorurek polimeru tworzących rozgałęzione, poprzecinane formy. Stężenie centrów kwasowych oraz ich moc była porównywalna we wszystkich katalizatorach.

Katalizatory te były aktywne w testowanych reakcjach a najwyższą aktywność wykazywał katalizator zawierający PANI-S osadzoną na CNT. Metanoliza triacetinu w jego obecności przebiegała podobnie jak w reakcji homogenicznej i uzyskano wydajność estrów metylowych ok. 95%. Centra aktywne w katalizatorach zawierających PANI-S osadzoną na węglu i krzemionce ulegały częściowej blokadzie w trakcie metanolizy triacetinu, co wiązano z adsorpcją diacetinu i/lub gliceryny. Obserwowaną blokadę centrów aktywnych wiązano z morfologią polimeru. Obecność zagregowanych struktur sprzyjała lokalnemu wzrostowi stężenia centrów aktywnych na powierzchni, co sprzyja oddziaływaniu z cząsteczkami "polioli", takich jak gliceryna. Oddziaływanie grup OH w glicerynie z protonami było dodatkowo wzmacniane przez strukturę mikroporowatą nośnika węglowego. Wynikiem tworzenia „filmu glicerynowego” na powierzchni katalizatora były efekty dyfuzyjne reagentów potwierdzone przez badania wpływu stężenia katalizatorów oraz energii aktywacji metanolizy triacetinu.

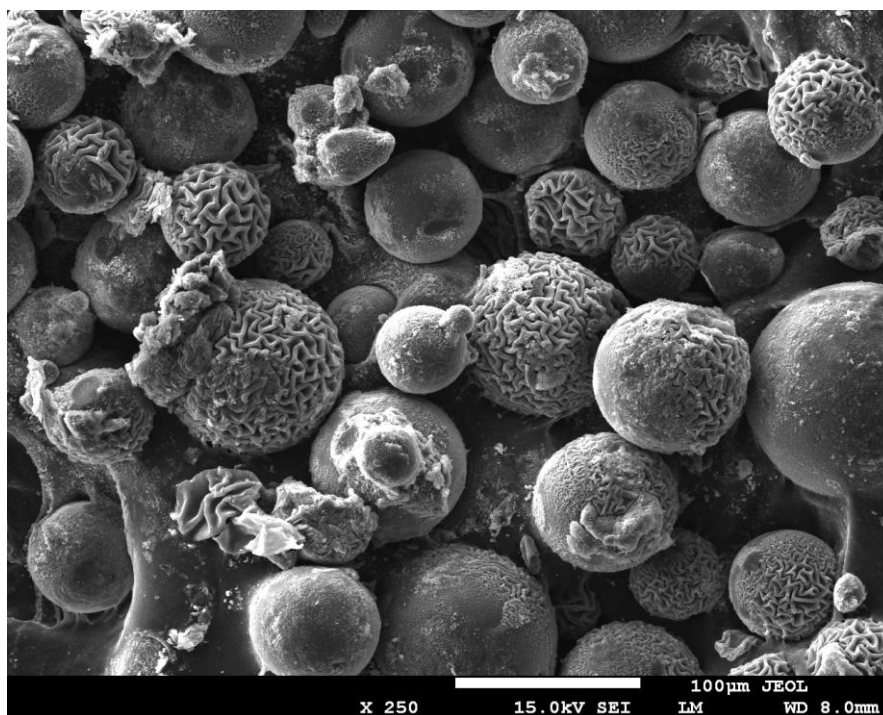


Rysunek 1. Siarczan polianiliny osadzony na CNT

1.13. Procesy selektywnego uwodornienia w obecności katalizatorów rutenowych

(dr Dorota Duraczyńska, prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, prof. Alina Drelinkiewicz)

Celem pracy było zbadanie właściwości katalitycznych nanocząstek rutenu immobilizowanych na nośnikach, w reakcjach uwodornienia prochiralnych ketonów do drugorzędowych alkoholi. Produkty takich reakcji są często wykorzystywane jako prekursorzy otrzymywania leków lub związków biologicznie czynnych. Jako reakcję testową wybrano uwodornianie acetonu do 1,2-propanodiolu. Reakcja ta jest jednym z istotnych etapów syntezy Levofloxacinu, leku o działaniu antybakteryjnym. Katalizator rutenowy immobilizowano na nośnikach polimerowych posiadających grupy funkcyjne zdolne do oddziaływania z centrami Ru. W charakterze nośnika wykorzystano ko-polimer na osnowie metakrylanu glicydydu funkcjonalizowany dwoma typami amin - achiralną i chiralną. Otrzymane katalizatory heterogeniczne zostały scharakteryzowane metodami FT-IR, XRD, SEM, EDS, STEM, XPS i DSC. Do ustalenia warunków prowadzenia procesu katalitycznego wybrano katalizator immobilizowany na polimerze funkcjonalizowanym aminą achiralną. W wyniku optymalizacji uwodornienie prowadzono w reaktorze periodycznym z mieszaniem, w łagodnych warunkach: ciśnienie wodoru 1 atm, temperatura 40°C. Reakcję prowadzono w obecności około 0.2 g katalizatora (2% wag. Ru), zwilżonego wodą. Aceton wprowadzano w postaci roztworu w izooktanie. W tych warunkach po 1 godzinie następowało całkowite przereagowanie acetonu do drugorzędowego alkoholu (selektywność 100%). Opracowano metodę rozdzielania optycznych izomerów produktu reakcji i stwierdzono, że alkohol otrzymany w wyniku reakcji na katalizatorze Ru osadzonym na nośniku funkcjonalizowanym aminą achiralną jest racematem izomerów R i S.



Rysunek 1. Katalizator Ru (2% wag.) na nośniku polimerowym

2. Fizykochemia powierzchni i nanostruktur - eksperyment i teoria

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

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

Układy metal-tlenek sprzężone oddziaływaniem wymiennym.

W ostatnich latach obserwuje się znaczny wzrost ilości badań układów magnetycznych złożonych z cienkich warstw epitaksjalnych na podłożach monokrystalicznych z uwagi na ich duże znaczenie technologiczne np. w przemyśle mikroelektronicznym. Układy te, w postaci dwu i wielowarstwowych systemów, a także supersieci, są bardzo atrakcyjne z uwagi na możliwość modelowania ich właściwości magnetycznych (np. anizotropii czy magnetostrykcji) poprzez dobór grubości warstwy metalu lub tlenku, poprzez procedury wzrostu warstw lub poprzez dobór podłoża. Celem podjętych badań było określenie wpływu preparatyki oraz własności strukturalnych na właściwości magnetyczne i elektronowe warstw granicznych w cienkowarstwowych układach metal-tlenek. Do badania wybrano układy Fe-CoO i Fe-NiO (FM/AFM) o różnej sekwencji warstw, charakteryzujące się występowaniem w niskich temperaturach oddziaływania wymiennego typu "exchange-bias". Struktura spinowa badanych układów była obrazowana przy użyciu fotoemisyjnej mikroskopii elektronowej (PEEM) z zastosowaniem promieniowania synchrotronowego. Uzyskano informację dotyczącą wpływu temperatury oraz zewnętrznego pola magnetycznego na struktury domenowe poszczególnych warstw. Wyniki zostaną wykorzystane w pracach związanych z uruchomieniem polskiego synchrotronu, w publikacjach oraz w pracy doktorskiej, a także były podstawą wniosku o projekt NCN typu Harmonia.

Modelowe katalizatory typu metal-tlenek.

Celem pracy było określenia zależności pomiędzy składem i strukturą fazy bimetalicznej a potencjalnymi właściwościami katalitycznymi dla układu zawierającego Au i Fe zdyspergowane na powierzchni rutyłu $\text{TiO}_2(110)$. W celu zbadania wpływu promotora na właściwości fizykochemiczne modelowego katalizatora, wytworzone w warunkach ultra wysokiej próżni układy bimetaliczne zostały scharakteryzowane *in situ* przy pomocy skaningowej mikroskopii tunelowej i spektroskopii fotoelektronów wzbudzanych promieniowaniem X. Badania przeprowadzone techniką temperaturowo programowanej desorpcji (TPD) pozwoliły na określenie potencjalnych właściwości katalitycznych.

Wstęp do analizy układów bimetalicznych stanowiły badania nukleacji i wzrostu czystego złota i żelaza na powierzchni rutyłu. Eksperymenty pokazały, że złoto nukleuje preferencyjnie na brzegach stopni i na defektach znajdujących się na tarasach, natomiast nanocząstki żelaza pokrywają równomiernie całą powierzchnię TiO_2 . W związku z różnicami w sposobie nukleacji i typie wzrostu obu metali powstające w temperaturze pokojowej klasterki żelaza są od 1,5 do 2 razy mniejsze niż klasterki Au. Istotnym elementem badań była analiza wpływu preadsorbowanego żelaza na adsorpcję złota oraz na stabilność temperaturową bimetalicznych klastrów. Pokazano, że Fe stabilizuje klasterki i zwiększa ich gęstość. Dla takich modelowych katalizatorów przebadano ich właściwości adsorpcyjne dla CO w szerokim zakresie temperatury.

Podsumowując można stwierdzić, że przedstawione w pracy badania pokazały, że zastosowanie żelaza jako prekursora dla procesu depozycji złota może mieć pozytywny wpływ na właściwości katalityczne katalizatorów rzeczywistych. Podwyższonej aktywności katalitycznej można oczekiwać ze względu na dużą dyspersję bimetalicznych klastrów wykazujących ponadto zwiększoną stabilność w podwyższonych temperaturach.

2.2. Analiza stanów elektronowych pierwiastków na powierzchniach materiałów aktywnych w heterogenicznych reakcjach chemicznych

(prof. Józef Korecki, dr Jacek Gurgul, dr Robert Socha)

Głównym celem prac badawczych wykonywanych w Laboratorium Powierzchni i Nanostruktur było określenie stanów elektronowych pierwiastków znajdujących się na powierzchniach różnych materiałów aktywnych w heterogenicznych reakcjach chemicznych. Prace Laboratorium w ponad 50% czasu pracy były poświęcone realizacji wymienionego celu i obejmowały badania zebrane w poniższej tabeli.

I.p.	Kierownik Grupy	Temat	Liczba próbek
1	P. Warszzyński	Tlenek grafenu	25
		Adsorpcja Ca na poliwarstwach	18
2	P. Nowak	Adsorpcja związków organicznych na minerałach	3
		Stopy z kobaltem i palladem	2
		Elektrody do ogniw paliwowych	10
		Nanorurki węglowe	2
3	Z. Adamczyk	Nanocząstki srebra na Si	6
		HSA/mika	8
		Poliwarstwy	43
4	T. Machej	Sole heteropolikwasów o strukturze Keggina	9
5	A. Drelinkiewicz	Nanocząstki palladu na różnych podłożach	14
		Polipirole	14
6	E. Serwicka	Minerały warstwowe Cu:Mn:Al.	4
		Utlenianie cyklooktanu (Mo)	1
7	J. Korecki	Zeolity FeSiBEA	12
		Nanodruty na solach heteropolikwasów	12
		Materiały elektrodowe	3
8	A. Bielański	Heteropolikwas o strukturze Dawsona	1

Przykładowe wyniki dotyczą katalizatorów pracujących w układzie gaz/ciało stałe (zeolit BEA) oraz ciecz/ciało stałe (grafen i tlenek grafenu). W podjętych badaniach zeolitu BEA użyto dwuetapowej syntezy, w której w kontrolowany sposób wprowadza się jony Fe do sieci zeolitu BEA. Stany elektronowe otrzymanych w ten sposób próbek były szczegółowo badane przy użyciu spektroskopii fotoelektronów wzbudzanych promieniowaniem X (XPS). Szczegółowa analiza stanów żelaza została dodatkowo wsparta spektroskopią mössbauerowską dla jąder ^{57}Fe . Z badań przeprowadzonych na układzie Fe-SiBEA wynika, że w układzie o maksymalnym stężeniu żelaza 3.8% wagowych, izolowane jony Fe^{3+} wbudowują się głównie w pozycje tetraedryczne. W przypadku wyższego stężenia Fe(III) w próbkach obserwuje się tworzenie oligomerycznych układów tlenkowych.

Celem szeroko prowadzonych badań tlenku grafenu (GO) było określenie warunków prowadzenia procesu redukcji GO tak, by otrzymać warstwy grafenu. Analiza XPS pozwoliła powiązać zastosowaną metodykę z wynikiem redukcji. Redukcję GO prowadzono metodami chemicznymi (np. reakcja z hydrazyną w środowisku wodnym) oraz fizycznymi (np. wygrzewanie w próżni, naświetlanie światłem UV). Stwierdzono, że redukcja chemiczna oraz temperaturowa prowadzą do zredukowania ponad 80% at. GO, natomiast naświetlenie promieniowaniem UV tylko do ok. 50%.

Uzyskane wyniki pozwolą na opracowanie metod syntezy selektywnych układów katalitycznych typu Fe-SiBEA oraz uzyskanie warstw grafenu zoptymalizowanych do zastosowania w układach funkcjonalnych.

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

(prof. Ewa Broclawik)

Celem badań prowadzonych w 2012 roku było określenie szczegółowego charakteru przepływów elektronów pomiędzy centrum Cu(I) w zeolicie a adsorbowaną cząsteczką NO oraz wyjaśnienie ich wpływu na mechanizm aktywacji NO a także roli, jaką odgrywa zeolit w promowaniu aktywności miedzi.

Analiza opierała się na teoretycznej metodzie NOCV (Natural Orbital for Chemical Valence), rozkładającej całkowitą zmianę gęstości elektronowej spowodowaną adsorpcją cząsteczki NO na centrum aktywnym, na niezależne kanały przepływu elektronów pomiędzy fragmentami, zdefiniowanymi jako centrum Cu(I) oraz wolny ligand NO. Analizę NOCV w rozdzielczości spinowej (nieodzownej wobec rodnikowego charakteru cząsteczki NO) wykonano z wykorzystaniem własnego oprogramowania (<http://www.chemia.uj.edu.pl/~mradon>). Rozważony trzy modele adsorpcji NO na centrum miedziowym: cząsteczka NO oddziałująca z izolowanym kationem Cu⁺ (a: [CuNO]⁺); z kationem Cu⁺ koordynowanym przez anion [Al(OH)₄]⁻ (b: (T1)CuNO); oraz przez większy fragment zeolitu (c: (M7)CuNO). Tabela przedstawia miarę ilości elektronów przekazanych pomiędzy NO a odpowiednio koordynowaną miedzią za pośrednictwem najważniejszych kanałów przepływu, z wyodrębnieniem polaryzacji spinowej α i β . Nasze wyniki potwierdziły, że w całkowitym transferze elektronów pomiędzy NO a centrum Cu(I) w zeolicie dominuje π^* -donacja zwrotna (wspomagająca aktywację cząsteczki NO) podczas gdy dla izolowanego kationu Cu⁺ przeważa donacja niesparowanego elektronu (osłabiająca aktywację), efektywna tylko dla polaryzacji spinowej α . Analiza przepływów dla alternatywnego wyboru fragmentów ([Cu⁺-NO] oraz [T1] lub [M7]) ilościowo pokazuje wpływ otoczenia zeolitowego na donację i donację zwrotną pomiędzy miedzią a ligandem NO oraz wyjaśnia, dlaczego centrum Cu(I) w zeolicie ZSM-5 wykazuje wysoką aktywność w katalitycznym rozkładzie NO na pierwiastki, w przeciwieństwie do izolowanego kationu.

		v_i , miara ilości przekazanych elektronów		
		[CuNO] ⁺	(T1)CuNO	(M7)CuNO
donacja niesparowanego elektronu (nie sprzyja aktywacji NO)	α	0.46	<0.1	<0.1
	β	-	-	-
donacja zwrotna (sprzyja aktywacji NO)	α	0.23	0.39	0.38
	β	0.21	0.33	0.32

Nowym, bardzo interesującym wynikiem badań jest wskazanie roli polaryzacji spinowej, która ujawnia się dopiero po zastosowaniu rozdzielczości spinowej. Pokazano, że poszczególne przepływy elektronowe mogą być efektywne tylko dla wybranych polaryzacji spinowych, co może mieć duże znaczenie dla badań w aktywnie rozwijającej się dziedzinie *katalizy spinowej*.

2.4. Badania nad mechanizmem reakcji katalitycznej dioksygenaz intradiolowych metodami teoretycznymi

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

Celem prowadzonych prac badawczych było poznanie mechanizmu reakcji katalitycznej dioksygenaz intradiolowych – metaloenzymów zależnych od Fe(III) występujących w niektórych szczepach bakterii glebowych i zaangażowanych w biodegradację związków aromatycznych. Realizowane prace obejmowały symulacje komputerowe metodami dynamiki molekularnej, obliczenia metodami DFT oraz obliczenia z wykorzystaniem metod hybrydowych QM/MM. Wyznaczono profile energii dla trzech możliwych mechanizmów szczegółowych, które mogą być odpowiedzialne za utleniające otwarcie pierścienia aromatycznego oraz przeanalizowano zmiany struktury elektronowej reagentów wzdłuż ścieżek reakcji. Analiza otrzymanych wyników pozwoliła na zidentyfikowanie kilku czynników strukturalno-elektronowych odpowiedzialnych za specyficzną reakcję katalizowaną przez badane enzymy.

2.5. Właściwości katalityczne niestechiometrycznych powierzchni V_2O_5 - modelowanie teoretyczne

(prof. Małgorzata Witko, dr Robert Gryboś)

Celem prowadzonych badań było określenie właściwości tzw. niestechiometrycznych powierzchni V_2O_5 metodami chemii kwantowej. W poprzednich badaniach rozważaliśmy stabilność różnych terminacji dwóch powierzchni niskoindeksowych: (100) i (001), w porównaniu do najbardziej stabilnej powierzchni (010). W trakcie prac dało się zauważyć tendencję do relaksacji powierzchni po utworzeniu wakancji tlenowej. Relaksacja powodowała znaczące obniżenie energii potrzebnej do utworzenia wakancji tlenowej, co sugerowało, że powierzchnie inne niż (010) mogą być bardzo aktywne w reakcjach całkowitego spalania. Dodatkowo, pojawiające się po relaksacji powierzchni, łańcuchy atomów wanadu o koordynacji tetraedrycznej przypominały strukturę amorficznego tlenku wanadu. Zbadanie mechanizmu tworzenia takich powierzchni oraz ich właściwości pozwoliłoby na lepsze zrozumienie działania katalizatorów opartych na pięciotlenku wanadu.

Przeprowadzono szereg obliczeń dla powierzchni (100) V_2O_5 z użyciem komórek o różnych rozmiarach. Dokonano także symulacji metodą dynamiki molekularnej dla temperatur 10, 100 i 1000K. W żadnym przypadku nie zaobserwowano rekonstrukcji powierzchni bez utworzenia wakancji. Dopiero wymuszona deformacja polegająca na utworzeniu mostków V-O-V pomiędzy rzędami atomów wanadu na powierzchni doprowadziła do rekonstrukcji bez konieczności tworzenia wakancji. Dla nowej, zrekonstruowanej powierzchni obliczono parametry ważne z punktu widzenia katalizy: (i) zdolność utlenienia CO do CO_2 przez utworzenie wakancji tlenowej, która obrazuje aktywność w reakcji insercji atomu tlenu do zaadsorbowanej cząsteczki; (ii) stabilność powierzchniowych grup OH wobec ataku rodnika HS, który odrywa atom wodoru i przekształca się w H_2S , która obrazuje aktywność w reakcji oderwania atomów wodoru od zaadsorbowanej cząsteczki. Obie aktywności są wyrażone przez termodynamiczny efekt odpowiednich reakcji.

Nowa, zrekonstruowana powierzchnia (100) jest bardziej stabilna od powierzchni wyjściowej. Wielkość stabilizacji zależy od przyjętej głębokości na jaką rekonstrukcja propaguje się pod powierzchnię i wynosi od 0.03 J/m^2 jeśli tylko warstwa powierzchniowa ulega rekonstrukcji, do 0.11 J/m^2 jeśli rekonstrukcja sięga trzech warstw wanadowych (ok. 7 \AA) w głąb kryształu.

W wyniku rekonstrukcji uległy zmianie rodzaje centrów tlenowych obecnych na powierzchni. Przed rekonstrukcją wyróżnić można było dwa rodzaje centrów – O1 i O2, pojedynczo oraz podwójnie skoordynowane. Po rekonstrukcji pojawiają się cztery centra tlenowe: pojedynczo skoordynowane O1, oraz trzy rodzaje centrów podwójnie skoordynowanych: O2, O2' i O2". Interesujące jest porównanie parametrów katalitycznych dla powierzchni (010) oraz zrekonstruowanej i niezrekonstruowanej powierzchni (100). Na stabilnej powierzchni (010) największą zdolność utleniania CO wykazuje centrum tlenowe O1, dając wartość energii reakcji -1.61 eV. Niezrekonstruowana powierzchnia (100) wykazuje znacznie większą aktywność, -1.99 eV, natomiast po rekonstrukcji wartość ta spada do -1.75, co pokazuje, że aktywność powierzchni (100) w reakcji całkowitego spalania nie jest aż tak duża jak wskazywały pierwsze obliczenia. Wpływ rekonstrukcji na stabilność grup OH jest podobna. Relatywnie stabilne grupy OH (-0.34 eV) na powierzchni niezrekonstruowanej, okazują się umiarkowanie stabilne (-1.03 eV) po rekonstrukcji. Dla porównania, stabilność grup OH na powierzchni (010) jest jeszcze mniejsza i wynosi -1.25 eV.

Uzyskano całkowicie nową, zrekonstruowaną strukturę powierzchni (100) V_2O_5 i określono jej podstawowe parametry katalityczne. Dalsze badania skoncentrują się na znalezieniu podobnej rekonstrukcji dla powierzchni (001) oraz dokładniejsze zbadanie i porównanie obu powierzchni.

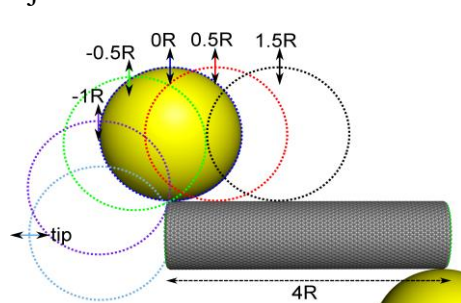
2.6. Centra adsorpcyjne nanocząstek koloidalnych na powierzchniach nanorurek węglowych

(dr hab. Tomasz Pańczyk prof IKiFP)

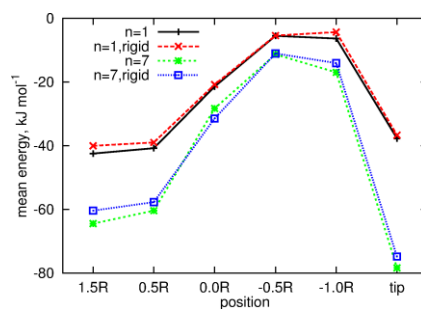
Oddziaływanie nanocząstek koloidalnych z powierzchnią nanorurek węglowych prowadzi do powstania materiałów hybrydowych o interesujących właściwościach. Tą drogą otrzymuje się materiały o strukturze włókien o kontrolowanych właściwościach elektrycznych, magnetycznych, biologicznych oraz katalitycznych. Ważnym aspektem w projektowaniu i ocenie właściwości takich materiałów jest możliwość ich badania na poziomie mikroskopowym z użyciem metod modelowania komputerowego. Jednakże, ze względu na duże rozmiary takich układów i brak możliwości stosowania geometrii wycinka, bezpośrednie zastosowanie standardowych metod modelowania molekularnego jest bardzo mało efektywne. Celem badań było zatem stworzenie modelu rozpuszczalnika niejawnego oraz pola siłowego umożliwiającego modelowanie układów złożonych z cząstek koloidalnych o rozmiarach rzędu 100 Å oraz wielościennych nanorurek węglowych o rozmiarach rzędu (200 x 80 Å).

Podstawowymi komponentami pola siłowego był potencjał Hamakera do opisu oddziaływań koloid-koloid oraz koloid-atom, oraz półempiryczny potencjał ai-REBO (Brennera) do opisu struktury nanorurek węglowych. Model rozpuszczalnika niejawnego opracowany został na podstawie analizy wartości stałych Hamakera dla oddziaływań koloid-atom poprzez rozpuszczalnik. Porównując wartości pracy adhezji w układzie odniesienia zawierającym jawnie cząsteczki wody oraz w układzie traktującym rozpuszczalnik jako medium niejawne wyprowadzono ogólne zależności pozwalające na 'dostrojenie' modelu rozpuszczalnika niejawnego tak by prawidłowo odtwarzał pracę adhezji w układzie rzeczywistym.

Opracowany model i pole siłowe zastosowano do określenia preferowanych lokalizacji nanocząstek koloidalnych o różnych właściwościach fizykochemicznych na powierzchniach wielościennych nanorurek węglowych. Badania były prowadzone przy użyciu dynamiki molekularnej z wykorzystaniem pół-empirycznego potencjału REBO do opisu struktury giętkich nanorurek węglowych oraz zakładając model nanorurki sztywnej. Rysunki 1 i 2 przedstawiają wybrane wyniki uzyskane w ramach tych badań; Rys. 1 definiuje lokalizację nanocząstek na powierzchni nanorurki węglowej zaś Rys. 2 przedstawia zmiany energii adsorpcji w funkcji tej lokalizacji.



Rysunek 1. Lokalizacja nanocząstki na powierzchni nanorurki węglowej



Rysunek 2. Energia adsorpcji w funkcji lokalizacji oraz dla modelu nanorurki giętkiej i sztywnej

Przeprowadzane badania pozwoliły stwierdzić, że: (i) najsilniejsze oddziaływania występują albo na czołach nanorurek (dla nanorurek wielościennych) albo na ściankach bocznych (dla nanorurek jednościennych), w każdym przypadku obserwuje się istnienie bariery energetycznej na krawędziach nanorurek, (ii) deformacja struktury nanorurek zachodzi, gdy nanocząstki zbudowane są z materiału o dużej stałej Hamakera (np. metale), typowe tlenki metali prowadzą do umiarkowanych oddziaływań i dla tych przypadków nanorurki wielościenne są wystarczająco twarde aby nie ulegać deformacjom na skutek adsorpcji nanocząstek.

2.7. Dynamika tworzenia alginianu wapnia - symulacje komputerowe

(prof. Władysław Rudziński, dr Wojciech Płaziński)

W literaturze daje się zauważyć brak eksperymentalnych oraz teoretycznych wyników, opisujących asocjację łańcuchów poliguluronianów w obecności jonów wapnia. Celem badań było zapewnienie tej luki poprzez zastosowanie odpowiednich technik modelowania molekularnego. Badania dotyczyły identyfikacji możliwych stanów przejściowych istniejących pomiędzy stanami układu, które można opisać jako: 'rozłączone łańcuchy' a 'łańcuchy połączone za pośrednictwem jonów wapnia'.

Badania przeprowadzono za pomocą standardowej techniki dynamiki molekularnej (MD) wspomaganej przez algorytmy *Transition Path Sampling* (TPS). Umożliwiło to efektywne zebranie odpowiednich ilości (>1000) 'reaktywnych' trajektorii oraz poddanie ich późniejszej analizie.

Wywołana przez obecność jonów wapnia asocjacja łańcuchów poliuronianów zachodzi w następujących etapach: (i) Przybliżenie się łańcuchów do siebie na odległość ~1,4 nm połączone z wykształceniem się niespecyficznych wiązań wodorowych. (ii) Wiązanie jonu wapnia przez grupy karboksylowe należące do dwóch różnych łańcuchów. Na tym etapie możliwe jest istnienie wielu różnych struktur pośrednich, zawierające cząsteczki wody 'mostkujące' pomiędzy jonami wapnia (koordynacja) a grupami karboksylowymi (wiązanie wodorowe). (iii) Wykształcenie się finalnej sieci wiązań wodorowych, odpowiadającej równowagowej strukturze kompleksu. W niektórych przypadkach wykształcenie się ww. sieci następuje jeszcze przed ostatecznym związaniem jonu. Przekraczanie barier energii swobodnej przez układ jest związane z utratą kolejnych cząsteczek wody przez jon wapnia, obecnych w jego pierwszej strefie koordynacyjnej.

Wyniki wyjaśniają mechanizm molekularny wiązania jonów wapnia przez dwa łańcuchy poliguluronianu (układ modelowy), ale mogą również być wykorzystane do opisu procesu żelowania innych poliuronianów.

2.8. Badania nad możliwościami selektywnej modyfikacji witaminy B₁₂ - potencjalnego nośnika leków

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

Celem badań teoretycznych było zbadanie zdolności do selektywnej modyfikacji struktury kobalaminy (witaminy B₁₂) w obrębie podstawników bocznych pierścienia korynowego, jako potencjalnego nośnika leków. Motywacją do podjęcia proponowanych badań jest zaobserwowane zwiększone zapotrzebowanie komórek w ich stanach patologicznych na szereg związków chemicznych, w tym witaminę B₁₂. Kobalaminę zbadano pod kątem dwóch różnych funkcjonalizacji: a) możliwości selektywnego wiązania bio-aktywnych jonów metali poprzez koordynację do grup bocznych pierścienia korynowego - o czym decydować będzie zróżnicowanie ich właściwości nukleofilowych; b) sterowanie właściwościami fizykochemicznymi (w szczególnością hydro-filo/fobo-wością) jej pochodnych, tak by była rozpuszczalna w środowisku wodnym albo lipidowym.

Prezentowane badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą w ramach teorii funkcjonałów gęstości (DFT) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z użyciem przybliżenia RI do wyznaczenia całek kulombowskich. Wszystkie elektrony w układzie opisano za pomocą gaussowskich funkcji typu def2-TZVP. Do badań wybrano niemodyfikowaną cząsteczkę witaminy B₁₂ oraz jej pochodną - dicyjanokobinamid, obie dostępne dla potrzeb syntez organicznych. Badane układy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań i kąty walencyjne) oraz elektronowych (rzędy wiązań Mayera, ładunki ESP, potencjał elektrostatyczny). Możliwość uzyskania wybranych izomerów zbadano porównując ich względną stabilność ocenioną na podstawie obliczonych entalpii swobodnych tworzenia.

W pierwszym kroku określono parametry elektronowe grup amidowych, będących grupami funkcyjnymi podstawników niemodyfikowanej witaminy B₁₂ (w lit. oznaczane *a-g*). Stwierdzono, że wszystkie atomy azotu grup -CONH₂, zdolne do koordynacji jonów metalu, posiadają ujemny ładunek ESP, który waha się w granicach -0.89 ÷ -1.02. Brak jednak dużej zmienności wartości ładunku, co przełoży się na nieselektywne wiązanie jonu metalu przez badane podstawniki. Następnie przebadano pochodną witaminy B₁₂ - dicyjanokobinamid, funkcjonalizowany poprzez podstawienie podstawników amidowych grupami estrowymi. Zmiana charakteru łańcucha bocznego dołączonego wiązaniem estrowym do rdzenia witaminy B₁₂ umożliwia sterowanie właściwościami fizykochemicznymi uzyskanego nośnika (np. hydro-filo/fobo-wością). Zidentyfikowano miejsca nukleofilowe w cząsteczce: są nimi ligandy aksjalne kobaltu oraz bezpośrednio sąsiedztwo grup estrowych. Najgorsze właściwości posiada łańcuch *a* (najmniejsza wartość ładunku na tlenie), pozostałe atomy tlenu wykazują zbliżone właściwości (ładunek w granicach -0.26 ÷ -0.32). Obecne w cząsteczce łańcuchy boczne sklasyfikowano pod kątem ich wzrastających właściwości elektrofilowych: $b \approx e < c \approx d \approx f < a \approx g$. Badając zmianę entalpii swobodnej stwierdzono, że preferencyjnie przekształceniu w amid ulegnie łańcuch *d*, zatem możliwe będzie uzyskanie połączeń z jonami metalu koordynujących ten fragment cząsteczki nośnika. Wykreślono potencjał elektrostatyczny wytwarzany przez dicyjanokobinamid. Stwierdzono, że cząsteczka nie jest symetryczna: od strony podstawników *c* i *d* widać wyraźne „wypłaszczenie” umożliwiające łatwiejsze oddziaływanie tą jej częścią, np. z powierzchnią, co będzie miało znaczenie w przypadku prób immobilizacji.

Wykonane badania umożliwiły wskazanie najłatwiej modyfikowalnych podstawników pierścienia korynowego, co ułatwi planowanie syntez pochodnych witaminy B₁₂ jako nośnika cząsteczek-leków. Wiedzę tę przekazano grupie eksperymentalnej, która prowadzi badania doświadczalne nad syntezami nowych pochodnych kobalaminy.

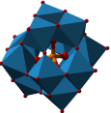
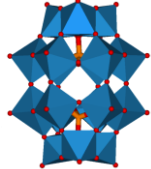
2.9. Właściwości katalityczne heteropolikwasów typu Keggina i Well-Dawsona, wyznaczone z obliczeń DFT

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

Celem przedstawianego projektu było porównanie właściwości kwasowo-zasadowych heteropolikwasów o strukturze Keggina i Well Dawsona. Centralną pozycję w anionie Keggina, $PW(Mo)_{12}O_{40}^{3-}$, zajmuje czworościan XO_4 z jonem centralnym. Tetraedr otoczony jest dwunastoma metaliczno-tlenowymi, połączonymi krawędziami oktaedrami, które tworzą cztery, połączone narożami, trójkowe zespoły Me_3O_{13} . HPA typu Dawsona, $P_2W(Mo)_{18}O_{62}^{6-}$, zbudowane są z dwóch zdefektowanych anionów Keggina (brak jednego z zespołów trójkowych) połączonych sześcioma wierzchołkami. Podobnie jak w anionie Keggina podstawowymi jednostkami strukturalnymi tych układów jest wewnętrzny tetraedr i tworzące zespoły trójkowe oktaedry Me-O. Badania właściwości centrów aktywnych w układach heteropolikwasów wykonane zostały w oparciu o teorię DFT przy użyciu lokalnego modelu klastrowego (program Turbomole), funkcjonal nielokalny PBE.

Z wyznaczonej analizy populacyjnej Mullikena (Tabela 1) wynika, że w układzie o strukturze Dawsona występuje zróżnicowanie ładunków, atomy położone bliżej środka struktury mają ładunki wyższe niż te położone na wierzchołkach. Właściwości kwasowo-zasadowe (których miarą jest ładunek) tych ostatnich są zbliżone do właściwości centrów aktywnych, obecnych w strukturze typu Keggina. Ładunki na tlenach Op (łączących dwie zdefektowane aniony Keggina) są zbliżone do ładunków na tlenach mostkowych Ob (łączących dwa atomy addenda z różnych zespołów trójkowych).

Tabela 1. Wyniki analizy populacyjnej Mullikena i energie orbitali granicznych dla heteropolikwasów wolframowych o strukturze Keggina i Dawsona.

		W	P	Oa	Ob	Oc	Od	Op	HOMO LUMO
Keggin		1.68	1.14	-0.70	-0.69	-0.63	-0.48	-	-7.03 -4.47
Dawson		1.71 1.66	1.11	-0.73 -0.63	-0.69 -0.65	-0.64	-0.55 -0.50	-0.67	-6.48 -4.35

Wyznaczone, dla układów solwatowanych (H_2O), wartości energii orbitali granicznych wskazują na wyższe wartości w HPA o strukturze Dawsona. Wcześniejsze obliczenia pokazały liniową korelację wartości energii LUMO od wartości potencjałów redox.

Na różnice w obydwu układach wskazuje również szczegółowa analiza orbitali granicznych. W układach typu Keggina orbitale HOMO zbudowany jest z orbitali 2p tlenów mostkowych Ob, Oc (odpowiedni udział procentowy wynosi 47% i 51%). Orbital LUMO składa się głównie z orbitali 5d atomów wolframu, z domieszką orbitali 2p tlenów Ob, Oc (12%, 13%). W układach typu Dawsona orbital HOMO składa się głównie (78%) z orbitali 2p tlenów Oa, będących częścią wewnętrznego tetraedru i niedostępnych dla reagentów. Orbital LUMO, podobnie jak w strukturze Keggina, to głównie orbitale atomów addenda, czyli wolframu (71%) z domieszką tlenów mostkowych Oc, łączących atomy wolframu w tym samym zespole trójkowym (27%).

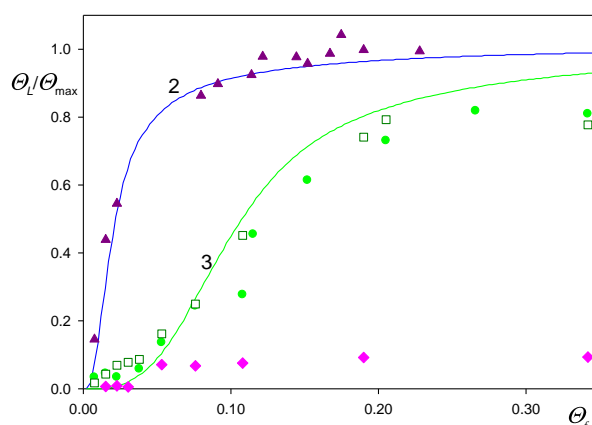
Preferowanym miejscem adsorpcji wodoru w układzie Keggina są tleny mostkowe Ob, Oc, w układzie Dawsona wyłącznie tleny Ob.

3. Nanostruktury materii miękkiej

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

(prof. Zbigniew Adamczyk, dr Jakub Barbasz, dr Małgorzata Nattich-Rak, mgr Marta Sadowska)

Opracowano efektywną metodykę detekcji monowarstw białek na stałych powierzchniach międzyfazowych. Metoda ta opiera się na niespecyficznych (elektrostatycznych) oddziaływaniach nośników koloidalnych (lateksów polistyrenowych) z białkami, tworzącymi warstewki powierzchniowe. Przy pomocy tej metody można w sposób ilościowy określić pokrycie powierzchniowe białka, a także rozkład ładunku powierzchniowego i potencjału zeta monowarstw białek w funkcji pH. Pozwala to z kolei na wyznaczenie punktu izoelektrycznego, co jest trudne przy użyciu metod objętościowych, np. elektroforetycznych wskutek agregacji białek. Znając pokrycie powierzchniowe można wyznaczyć również stężenie objętościowe białek. Czulość tej metody jest wysoka, umożliwiając efektywną detekcję białek w objętości już dla stężeń ok. 0,01 ppm (10 ppb). W celu wykazania użyteczności metody CE przeprowadzono serie pomiarów dla monowarstw fibrynogenu na mice. Monowarstwy te, o kontrolowanym pokryciu i konformacjach cząstek wytwarzano w warunkach transportu dyfuzyjnego z roztworów fibrynogenu o różnym pH i sile jonowej. Następnie, na warstewki te osadzano w warunkach kontrolowanego transportu dyfuzyjnego, cząstki ujemnego lateksu polistyrenowego o rozmiarach 800 nm. Pokrycie lateksu wyznaczano przy pomocy mikroskopii optycznej oraz mikroskopii sił atomowych. Wyniki pomiarów, w których wyznaczano wpływ pH na mechanizm adsorpcji lateksu są przedstawione na Rys. 1 w formie zależności znormalizowanego pokrycia lateksu Θ_L / Θ_{max} od pokrycia fibrynogenu Θ_f (dla siły jonowej 10^{-2} M). Uzyskane wyniki doświadczalne interpretowano ilościowo rozwiniętą w ramach niniejszych badań teorią fluktuacji (linie ciągłe na Rys. 1). Wykazano, że efektywne osadzanie cząstek lateksu zachodzi na centrach adsorpcji złożonych z dwóch (dla pH 3,5) lub trzech (pH 7,4-7,9) blisko siebie położonych cząsteczek fibrynogenu. Natomiast dla pH 11 osadzanie lateksu nie zachodzi. Wyniki te wskazują jednoznacznie, że osadzanie lateksu determinowane jest oddziaływaniami elektrostatycznymi, występującymi wskutek heterogeniczności rozkładu ładunku elektrycznego na cząsteczkach fibrynogenu.



Rysunek 1. Zależność znormalizowanego pokrycia cząstek lateksu polistyrenowego, Θ_L / Θ_{max} od stopnia pokrycia fibrynogenu Θ_f . Punkty oznaczają dane doświadczalne uzyskane dla siły jonowej 10^{-2} M oraz różnych wartości pH: (\blacktriangle), pH=3.5 (\bullet), pH=7.4, (\square), pH=9.7, (\blacklozenge), pH=11. Linie ciągłe przedstawiają wyniki doświadczalne obliczone na podstawie teorii fluktuacji dla centrów adsorpcji złożonych z dwóch (krzywa 2) oraz trzech (krzywa 3) blisko siebie położonych cząsteczek fibrynogenu.

3.2. Modelowanie adsorpcji nanocząstek - wieloskalowy opis teoretyczny kinetyki adsorpcji cząstek kulistych na powierzchni jednorodnej

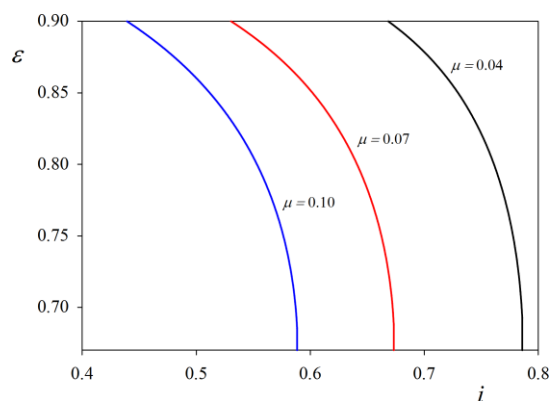
(dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP, mgr Magdalena Nosek, mgr inż. Piotr Batys, mgr inż. Michał Skoczek)

Powszechnie używaną metodą eksperymentalną do wielowarstwowej adsorpcji nanocząstek jest technika "warstwa po warstwie", polegająca na sekwencyjnej adsorpcji warstw cząstek o dodatnim i ujemnym ładunku powierzchniowym przez naprzemienne zanurzanie określonego nośnika w roztworach wodnych tych cząstek. Struktura wielowarstwy otrzymanej w ten sposób zależy silnie od liczby cykli adsorpcyjnych, pokrycia uzyskanego w każdym cyklu, a także oddziaływań między adsorbującymi cząstkami. Niestety w przypadku wielowarstw o grubości rzędu 1 μm dotychczas nie dysponowaliśmy zadowalającym modelem matematycznym ani metodami eksperymentalnymi, które pozwoliłyby na dokładne określenie istotnych parametrów otrzymanej wielowarstwy, takich jak jej grubość czy porowatość.

Celem badań prowadzonych w roku 2012 był ilościowy opis teoretyczny zależności granicznego prądu dyfuzyjnego, mierzonego w układzie wirującej elektrody dyskowej z zaadsorbowaną wielowarstwą monodispersyjnych cząstek koloidalnych, od takich parametrów układu jak masa zaadsorbowanej wielowarstwy, jej porowatość i grubość, powierzchnia elektrody, czy prędkość jej wirowania.

Uogólniony został wcześniej opracowany model teoretyczny dla monowarstwy cząstek monodispersyjnych na układy wielowarstw takich cząstek. Wyprowadzone zostały równania pozwalające na określenie masy cząstek drugiej warstwy poprzez pomiar całkowitej masy dwuwarstwy i pomiar natężenia granicznego prądu dyfuzyjnego płynącego przez warstwę po adsorpcji pierwszej i drugiej warstwy cząstek. Wyprowadzone zostały także równania opisujące zależność porowatości i grubości wielowarstwy zaadsorbowanej na elektrodzie dyskowej od jej masy, promienia zaadsorbowanych cząstek i natężenia granicznego prądu dyfuzyjnego, słuszne dla wielowarstw o porowatości $\varepsilon < 0.9$. Otrzymane wyniki teoretyczne zostały zweryfikowane eksperymentalnie poprzez pomiary masy wielowarstw cząstek o średnicy ok. 1 μm zaadsorbowanych na złotej elektrodzie dyskowej, z wykorzystaniem ultra mikrowagi, oraz pomiary natężenia granicznego prądu dyfuzyjnego płynącego przez wielowarstwę, z wykorzystaniem metody woltamperometrii cyklicznej. Stwierdzono dobrą zgodność wyników eksperymentalnych i przewidywań teoretycznych.

Wyniki naszych badań mogą zostać wykorzystane w dwóch różnych obszarach: produkcji urządzeń warstwowych, takich jak mikrokapsułki czy membrany, oraz wytwarzaniu układów objętościowych o kontrolowanych oddziaływaniach z otoczeniem. Przykładami tych ostatnich są pokrycia antykorozyjne, antyodblaskowe, antibakteryjne, antywibracyjne czy materiały biokompatybilne.



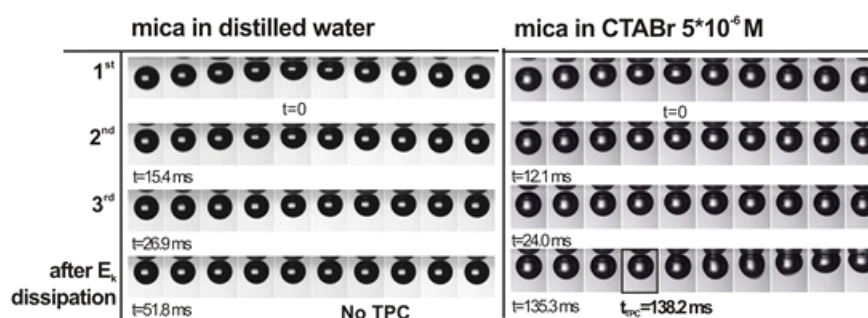
Rysunek 1. Zależność porowatości ε wielowarstwy cząstek koloidalnych od bezwymiarowego dyfuzyjnego prądu granicznego $i = I / I_L$, obliczona dla wybranych wartości bezwymiarowej masy wielowarstwy $\mu = m / (\rho S \delta_L)$, gdzie I , I_L , m , ρ , S i δ_L oznaczają odpowiednio graniczny prąd dyfuzyjny do elektrody pokrytej wielowarstwą, prąd Levich'a do elektrody dyskowej bez warstwy cząstek, masę zaadsorbowanej wielowarstwy cząstek, ich gęstość, pole powierzchni elektrody dyskowej, oraz grubość brzegowej warstwy dyfuzyjnej.

3.3. Wpływ ładunku elektrycznego na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni o niskiej hydrofobowości”.

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

Celem badań było określenie wpływu zmian stanu elektrycznego powierzchni międzyfazowych na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchniami stałymi o niskiej hydrofobowości. Kontakt trójfazowy w trakcie kolizji pęcherzyka z powierzchnią ciała stałego może powstać po przerwanie filmu ciekłego oddzielającego powierzchnię pęcherzyka od powierzchni ciała stałego. Zgodnie z teorią DLVO oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy podwójnymi warstwami elektrycznymi powierzchni międzyfazowych oraz siły van der Waalsa determinują stabilność równowagowych cienkich filmów ciekłych. A zatem zmiana wielkości, a zwłaszcza znaku ładunku elektrycznego jednej z powierzchni międzyfazowych filmu powinna zmniejszyć stabilność filmu zwilżającego i umożliwić powstanie kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe.

Wykonano pomiary wpływu preferencyjnej adsorpcji surfaktantów kationowych (*n*-alkilotrimetyloamoniowe bromki) na powierzchni międzyfazowej roztwór/gaz na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na hydrofilowej powierzchni miki. Pomiary wykonano dla dwóch różnych lokalizacji płytki miki ($L=3\text{mm}$ i $L=100\text{mm}$) względem kapilary, na której generowane były pęcherzyki powietrza, aby określić także wpływ utworzenia na powierzchni pęcherzyka, ruchem indukowanej dynamicznej architektury warstwy adsorpcyjnej (DAL), na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) na powierzchni miki. Wyidukowanie DAL oznacza, że na górnym biegunie wypływającego pęcherzyka znajduje się minimalna ilość zaadsorbowanych molekuł substancji powierzchniowo aktywnej, a na dolnym biegunie ich stężenie jest znacznie wyższe od równowagowego. Zjawiska zachodzące podczas kolizji pęcherzyka były monitorowane przy użyciu szybkiej kamery o częstotliwości 1040 Hz. Na rysunku przedstawiono sekwencje zdjęć ilustrujące przebieg kolizji w wodzie destylowanej i w roztworze $5 \cdot 10^{-6} \text{ M}$ roztworze CTABr.



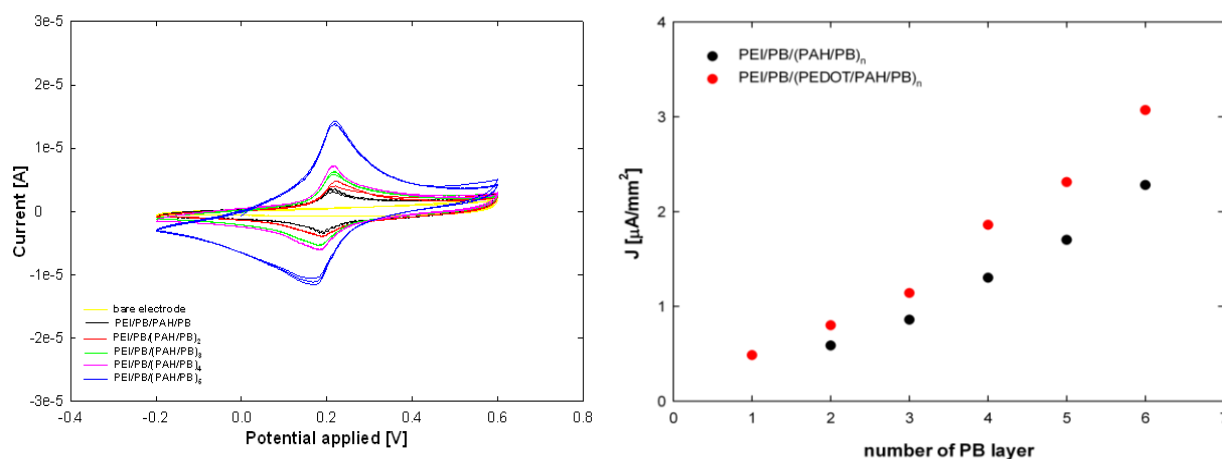
Adsorpcja kationowego surfaktantu (CTABr) na powierzchni pęcherzyka spowodowała powstanie TPC (patrz Rysunek) wskutek destabilizacji filmu zwilżającego (zmiana znaku ładunku powierzchni gaz/ /roztwór). Wykazano także, że czasy powstawania TPC (t_{TPC}) były wyraźnie krótsze w przypadku powierzchni miki umieszczonej w lokalizacji "blisko". Te różnice w wartościach t_{TPC} pokazują, że przy lokalizacji "daleko" na powierzchni pęcherzyka była już utworzona DAL i czas powstania TPC był wydłużony o czas niezbędny do przywrócenia na górnym biegunie pęcherzyka takich pokryć adsorpcyjnych kationowego surfaktantu, aby ładunek elektryczny powierzchni był dodatni. Przy lokalizacji "blisko" DAL nie była jeszcze utworzona i przyciągające oddziały-wania elektrostatyczne pomiędzy ujemną powierzchnią miki i dodatnią powierzchnią pęcherzyka powodowały szybsze utworzenie TPC.

3.4. Funkcjonalne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe

(prof. Piotr Warszyński z zespołem)

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

Celem zadania realizowanego w 2012 roku było określenie optymalnych warunków tworzenia wielowarstwowych filmów z elektroaktywnymi nanocząstkami błękitu pruskiego (PB) posiadającymi właściwościami elektrokatalitycznymi dla redukcji i utleniania nadtlenu wodoru. Filmy tego typu mogą służyć jako warstwy sensorowe do jego elektrochemicznej detekcji. Do konstrukcji wielowarstwowych filmów użyto również polielektrolitów przewodzących, których zadaniem było zwiększenie efektywności transportu elektronów do powierzchni elektrody. Kinetykę osadzania warstw a także masę osadzonego filmu wyznaczano za pomocą mikrowagi kwarcowej (QCM). Metodą woltamperometrii cyklicznej określono wpływ liczby warstw nanocząstek błękitu pruskiego w wielowarstwowym filmie naniesionym na złotą elektrodę na natężenie prądu redox oraz wpływ polielektrolitów przewodzących PDOT:PSS, polianiliny oraz polipyrrolu. Przykładowe rezultaty zostały zilustrowane na Rysunku 1.



Rysunek 1. Po lewej – przykładowe krzywe woltamperometryczne dla elektrody złotej pokrytej filmem zawierającym różną liczbę warstw z nanocząstkami błękitu pruskiego. Po prawej – porównanie zależności natężenia prądu redukcji PB od liczby warstw bez i w obecności polimeru przewodzącego PDOT:PSS w strukturze filmu.

Stwierdzono liniową zależność natężenia prądu redox PB od liczby warstw. Prąd ten ulegał wzmocnieniu w przypadku obecności polimerów przewodzących, przy czym największe wzmocnienie było obserwowane dla polianiliny. Przygotowane w ten sposób elektrody były użyte do elektrochemicznej detekcji nadtlenu wodoru w roztworze. Pokazaliśmy, że istnieje zależność liniowa pomiędzy liczbą warstw zawierających nanocząstki PB o natężeniem prądów redox H_2O_2 , jak również dla elektrody o danej liczbie warstw, pomiędzy natężeniem prądów redox a stężeniem nadtlenu wodoru w roztworze. Wprowadzenie polimerów przewodzących do struktury filmów wpływało korzystnie na możliwość detekcji H_2O_2 zwiększając czułość elektrody o około 20%.

Podjęte zostały próby użycia do konstrukcji wielowarstwowych filmów (PE/PB) płytek zredukowanego tlenku grafenu.

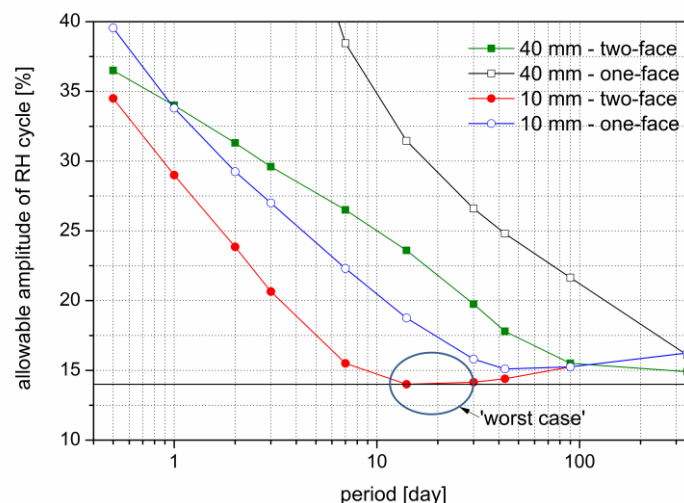
4. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

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

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

Zrealizowane zadanie miało na celu dalsze udoskonalenie modelowania metodą elementów skończonych dyfuzji pary wodnej i odkształceń w wielowarstwowej strukturze polichromowanego drewna w odpowiedzi na zmienne warunki klimatu otoczenia. Chodziło o rozpoznanie odpowiedzi polichromowanego drewna na cykliczne wahania wilgotności względnej odzwierciedlane w obliczeniach przez prostą funkcję sinus.

Każdy cykl wilgotności względnej o danej amplitudzie i okresie wywołuje określone odkształcenie w swobodnie odpowiadającej desce, które przenosi się na warstwę polichromii. Wielkość odkształcenia zależy od grubości deski i konfiguracji dyfuzji tj. czy para wodna przenika przez dwie czy jedną powierzchnię deski, przy czym ta druga sytuacja odzwierciedla skrajny efekt całkowitego braku przepuszczalności warstwy polichromii dla pary wodnej. Dopuszczalną amplitudę cyklu wilgotności zdefiniowano jako prowadzącą do krytycznego niedopasowania odpowiedzi wilgotnościowych podłoża drewnianego i warstwy dekoracyjnej, przy którym warstwa ta pęka dopiero po 100 lat; krytyczne niedopasowanie określono doświadczalnie w testach zmęczeniowych próbek imitujących polichromowane drewno.



Rysunek przedstawia dopuszczalną amplitudę sinusoidalnych cykli wilgotności względnej (zdefiniowaną jak wyżej) w 20°C w funkcji okresu cykli dla grubości deski wynoszących 10 i 40 mm i przepływu pary wodnej przez jedną lub dwie powierzchnie. Wzięto pod uwagę kierunek styczny drewna, o największej odpowiedzi wilgotnościowej.

Deska o grubości 10 mm i dwóch powierzchniach otwartych dyfuzyjnie, poddana cyklom dostatecznie długim, aby wywołać pełną odpowiedź, jest najgorszym przypadkiem w przeprowadzonych badaniach (zaznaczonym na wykresie owalem), a dopuszczalna amplituda cyklu wilgotności względnej wynosi w tym przypadku zaledwie $\pm 14\%$.

Przeprowadzone modelowanie pokazało, że umiarkowane wahania wilgotności względnej w przybliżonym paśmie $50 \pm 15\%$ są bezpieczne. Pasma to stanowi ostrożny "poziom odniesienia" przy określaniu norm dla bezpiecznej ekspozycji polichromowanego drewna. Poziom ten można określać na nowo, w miarę rozwoju badań doświadczalnych nad fizycznym pękaniem drewna polichromowanego przynoszących udoskonalone rozpoznanie odkształceń krytycznych.

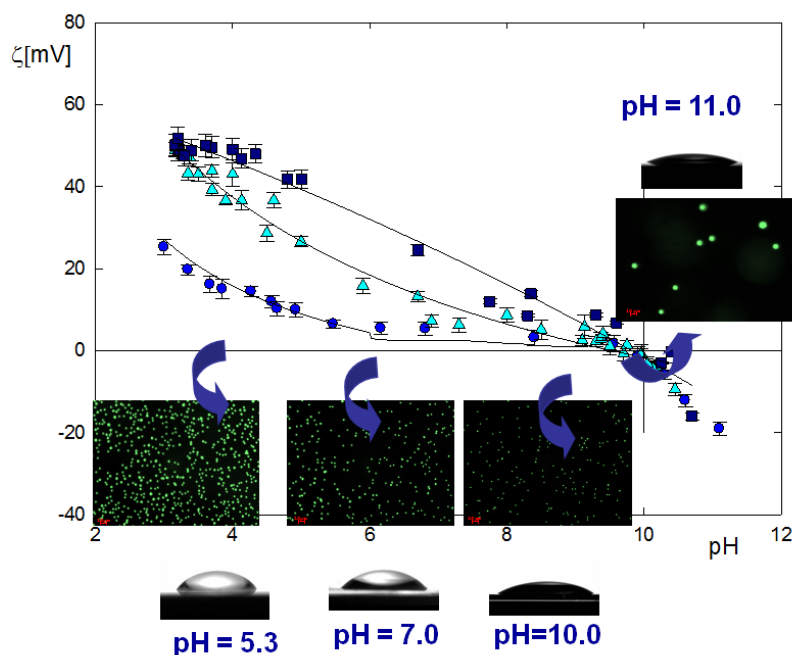
PROJEKTY BADAWCZE WŁASNE (MNiSW)

1. Opracowanie metody tworzenia biologicznie aktywnych multiwarstw zawierających polielektrolity-białka-dendryty

Projekt badawczy N N204 02536 [2009-2012]
(kierownik projektu: dr hab. Barbara Jachimska)

Adsorpcja białek odgrywa ważną rolę w wielu dziedzinach nauk przyrodniczych, w tym nauki o materiałach, nauki o koloidach czy biochemii. Kontrolowane tworzenie warstw białkowych wymaga wiedzy o strukturze białka w zależności do rodzaju elektrolitu, siła jonowa czy też pH roztworów. Konformacja białka w roztworze oraz konformacja na powierzchni adsorpcyjnej są ściśle ze sobą powiązane

Stosując szeroką gamę metod fizykochemicznych do charakterystyki białek w objętości można uzyskać informacje o ich stabilności konformacyjnej. Zmiany konformacji determinują strukturę 3D na powierzchni, zwłaszcza dla wyższych pokryć adsorpcyjnych, kiedy orientacja anizotropowych cząsteczek jest utrudniona ze względu na zawadę steryczną. Celem projektu było wyznaczenie mechanizmów tworzenia powłok białkowych oraz określenie niezbędnych właściwości fizykochemicznych tych procesów. Ponadto badania te mogą doprowadzić do powstania nowej technologii formowania powierzchni biologicznie aktywnych o kontrolowanej architekturze.



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

Projekt badawczy MNiSW N N507 269936 [2009-2012]

(kierownik projektu: dr inż. Aleksandra Pacuła)

Udało się w pełni zrealizować cele projektu - syntezę trzech rodzajów materiałów elektrodowych - kompozytów węglowo-tlenkowych i wydzielonych z nich materiałów węglowych oraz tlenków metali przejściowych, ich systematyczną charakterystykę fizykochemiczną oraz opis właściwości elektrodowych w alkalicznym środowisku. Realizacja projektu pozwoliła wyjaśnić wpływ składu fazowego, morfologii ziaren, stopnia krystaliczności, stopnia grafityzacji i porowatości na pojemność właściwą badanych materiałów. Najlepsze właściwości elektrodowe (odznaczające się największą pojemnością właściwą) miały materiały węglowe (ok. 10-30 F/g), a najgorsze tlenki metali przejściowych (<1 F/g). Wbrew pierwotnym oczekiwaniom kompozyty materiałów węglowych i tlenków metali przejściowych (ok. 5-15 F/g) nie miały lepszych właściwości elektrodowych od obu komponentów. Nie zaobserwowano także, aby w obecności badanych materiałów a zwłaszcza samych tlenków metali przejściowych przebiegały reakcje związane ze zmianą stopnia utlenienia metalu przejściowego i generujące dodatkowy ładunek elektryczny. Materiały o największym stężeniu składnika węglowego o grafitopodobnej strukturze miały najlepszą zdolność do gromadzenia ładunku elektrycznego w podwójnej warstwie elektrycznej wytworzonej na granicy elektroda/elektrolit. Prawdopodobnie przewodnictwo elektryczne materiałów węglowych, największe spośród badanych preparatów, odegrało w tym względzie ważną rolę. Ponadto jak pokazały wyniki z sorpcji azotu, materiały węglowe były zdecydowanie bardziej porowate niż kompozyty węglowo-tlenkowe. Porowatość ową zapewniała im odpowiednia morfologia depozytu węglowego głównie w postaci nanorurek węglowych jak również w formie amorficznego węgla, zawsze obecnego w materiałach otrzymanych w niskotemperaturowej pirolizie. Mniejsza porowatość kompozytów w stosunku do materiałów węglowych wynikała ze znacznej zawartości frakcji tlenkowej występującej w postaci dużych ziaren o małym rozwinięciu powierzchni. Nie zaobserwowano wyraźnego wpływu rodzaju i składu prekursora o strukturze hydrotalkitu na właściwości elektrodowe badanych materiałów. Natomiast temperatura syntezy kompozytów miała znaczący wpływ na stopień krystaliczności składnika niewęglowego i stopień grafityzacji składnika węglowego, co determinowało pojemność właściwą wszystkich trzech rodzajów materiałów elektrodowych. Najlepsze właściwości elektrodowe miały próbki otrzymane w najniższej temperaturze (600°C).

Opracowano nowe materiały elektrodowe, które ze względu na niskie wartości pojemności właściwej nie mają perspektyw aplikacyjnych do budowy superkondensatorów. Za to ze względu na zawartość związków kobaltu i/lub niklu mogą być przedmiotem dalszych badań na przykład w katalizie elektrochemicznej jako katalizatory ważnych reakcji zachodzących w ogniwach paliwowych - reakcji redukcji tlenu czy reakcji utleniania metanolu.

3. Teoretyczna i eksperymentalna analiza porowatości wielowarstwy kulistych cząstek koloidalnych

Projekt badawczy MNiSW N N204 347737 [2009-2012]

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

W ramach niniejszego projektu badawczego wykonano szereg zadań. Opracowano metody polerowania złotej elektrody dyskowej, która zapewniła wysoki stopień czystości i niewielką szorstkość powierzchni, koniecznych do uzyskania powtarzalnych wyników pomiarowych. Określono właściwości fizykochemiczne powierzchni elektrody przy pomocy metody AFM, elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej oraz pomiarów potencjału powierzchni w funkcji pH i siły jonowej roztworu. Punkt izoelektryczny tej powierzchni określono metodą kinetyki adsorpcji cząstek koloidalnych w funkcji pH elektrolitu.

Metodami dynamicznego rozpraszania światła i dyfraktometrii optycznej wyznaczono współczynnik dyfuzji, ruchliwość elektroforetyczną, wielkość i potencjał powierzchniowy kilku rodzajów cząstek koloidalnych, używanych następnie do adsorpcji, w funkcji stężenia elektrolitu i pH roztworu.

Opracowano metodykę i parametry procesu adsorpcji pojedynczej warstwy cząstek koloidalnych na powierzchni złotej elektrody dyskowej. Przeprowadzono adsorpcję dla kilku wartości pokrycia w różnych warunkach fizykochemicznych. Zaadsorbowane warstwy scharakteryzowano za pomocą mikroskopii optycznej.

Przeprowadzono obszerne badania elektrochemiczne. Wykorzystano metody woltamperometrii cyklicznej i elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej wirującej elektrody dyskowej. Pozwoliły one na określenie średnicy zaadsorbowanych cząstek i pokrycia powierzchni elektrody. Wyprowadzono równania określające zależność granicznego prądu dyfuzyjnego przez warstwę cząstek zaadsorbowanych na powierzchni wirującej elektrody dyskowej od pokrycia powierzchni elektrody i wielkości cząstek. Przewidywania teoretyczne porównano z wynikami eksperymentów i stwierdzono ich dobrą zgodność.

Metody elektrochemiczne zostały następnie wykorzystane do pomiarów parametrów wielowarstw cząstek koloidalnych. Okazały się one szczególnie przydatne do pomiarów porowatości i grubości wielowarstw cząstek kulistych, a także krętości toru jonów w tych warstwach. Wyniki pomiarów elektrochemicznych przeprowadzonych na wielowarstwach cząstek kulistych porównane zostały z wynikami pomiarów masy zaadsorbowanych cząstek za pomocą ultra-mikrowagi. Stwierdzono dobrą zgodność wyników pomiarów obydwoma metodami.

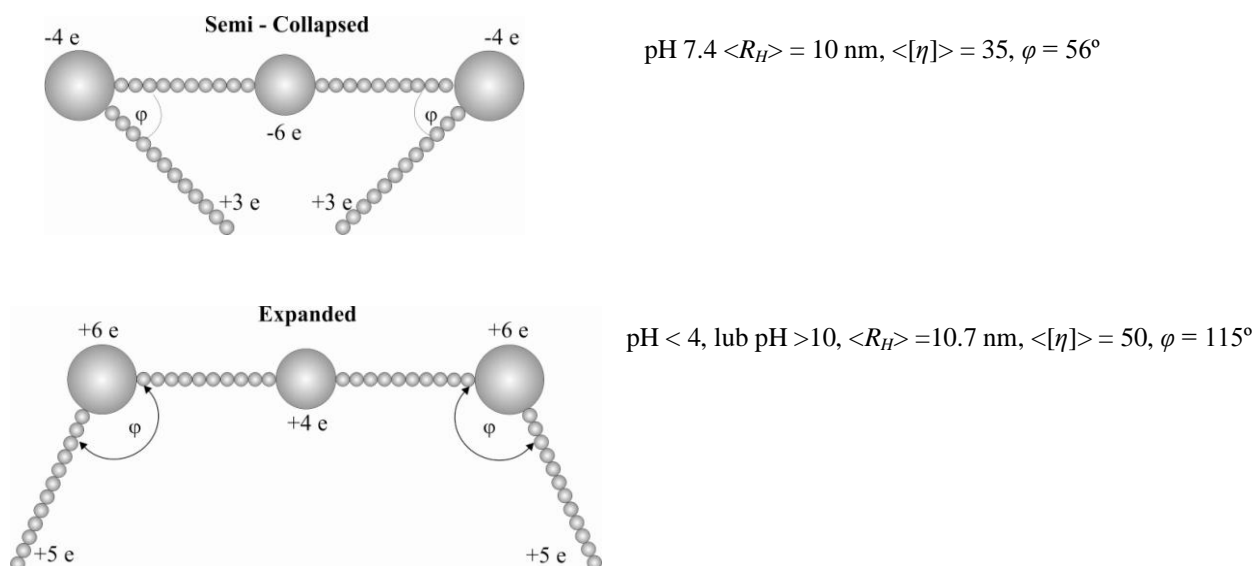
Opracowano również model teoretyczny wielowarstwowej adsorpcji cząstek kulistych i przeprowadzono symulacje komputerowe tego procesu w warunkach analogicznych do zastosowanych w eksperymentach. Wymulowane wielowarstwy scharakteryzowano ilościowo za pomocą różnorodnych funkcji rozkładu i parametrów średnich. Sformułowano szereg ważnych wniosków nt. właściwości wielowarstw syntezowanych metodą "warstwa po warstwie". Wyniki teoretyczne potwierdziły silną zależność uzyskanej struktury wielowarstwy od warunków jej syntezy. Porównanie wyników teoretycznych i eksperymentalnych wykazało, że były one zgodne, potwierdzając poprawność modelu teoretycznego.

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

Projekt badawczy MNiSW N N204 026438 [2009-2013]

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Znajomość tensorów ruchliwości hydrodynamicznej oraz lepkości wewnętrznej 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 (Rys. 1). Taka transformacja kształtu cząsteczki umożliwia przeprowadzenie obliczeń tensorów ruchliwości, dyfuzji oraz lepkości wewnętrznej dla różnych 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 do układu równań całkowych. Warto podkreślić, że w przeciwieństwie do poprzednich podejść teoretycznych, obliczenia przeprowadzone przez nas uwzględniają sprzężenie między ruchem translacyjnym, a rotacyjnym cząsteczki białka. Przy użyciu tego podejścia przeprowadzono obliczenia, które umożliwiły wyznaczyć średnicę hydrodynamiczną oraz lepkość wewnętrzną cząsteczki fibrynogenu, w zależności od ilości kul w ramionach bocznych oraz kąta φ tworzonego przez nie względem głównej osi cząsteczki (Rys. 1). Wykazano, że obliczenia te poprawnie opisują dane doświadczalne uzyskane przy pomocy metody DLS oraz pomiarów lepkości dynamicznej. Umożliwiło to określić w sposób jednoznaczny konformacje oraz rozkład ładunku elektrycznego cząsteczki fibrynogenu w roztworach elektrolitów o różnym pH (Rys. 1).



Rysunek 1. Konformacje oraz rozkład ładunku elektrycznego dla cząsteczki fibrynogenu, a także podstawowe parametry hydrodynamiczne obliczone teoretycznie

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

Projekt badawczy MNiSW N N204 271238 2010-2012]

(kierownik projektu: prof. Władysław Rudziński)

W 2012 roku zakończono realizację projektu. Uzyskane wyniki można streścić następująco:

- Modelowanie procesu równowagi wiązania wapnia. Zaproponowano modele uwzględniające możliwość jedno- lub dwucentrowego wiązania oraz efekt podwójnej warstwy elektrycznej (w kontekście tzw. żelu Donnana). Najkorzystniejsze wyniki dał model dwucentrowy przy założeniu, że to grupy karboksylowe alginianów wiążą jony metali ciężkich.
- Zaproponowano wyjaśnienie stosowności grupy modeli oraz wyrażeń półempirycznych opisujących wpływ pH oraz stężenia usuwanego jonu (C) na wydajność biosorpcji (q). Wyrażenia te przewidują występowanie zależnej od pH granicy wielkości q przy nieskończonym C .
- Przeprowadzono systematyczne porównanie mechanizmów opartych na wymianie jonowej oraz adsorpcji konkurencyjnej w kontekście zależnego od pH wiązania jonów metali przez biosorbenty.
- Opisano wpływ warunków niekontrolowanego (tj. zmiennego w czasie) pH roztworu na kinetykę biosorpcji (oraz, bardziej ogólnie, adsorpcji) w układach modelowych, przy zastosowaniu statystycznej teorii transportu międzyfazowego (SRT).
- Badano układy typu jon metalu / biosorbent z punktu widzenia efektów heterogeniczności powierzchni oraz ich przekładalności na ideę stałej wymiany jonowej
- Przebadano wpływ obecności jonów wapnia na sorpcję innego typu dwuwartościowych jonów metali w układach binarnych lub ternarnych (jeśli brać pod uwagę także wpływ pH). Rozpatrywano przypadek zarówno jedno- jak i dwucentrowego wiązania jonów metali.
- Badano problem interpretacji danych eksperymentalnych odnoszących się do termodynamiki wiązania dwuwartościowych jonów metali przez biosorbenty zawierające alginiany. Zaproponowano sposoby na odróżnienie pomiędzy "pozornymi" i "rzeczywistymi" wartościami ΔH i ΔS .
- Empiryczne równania pseudo-drugorzędowe (PSO, *pseudo-second order*) i pseudo-pierwszorzędowe (PFO, *pseudo-first order*), wykorzystywane w celu opisu kinetyki adsorpcji na granicy faz roztwór / ciało stałe, mogą być również wykorzystywane do opisu (korelacji) danych zmierzonych w układach jon metalu / biosorbent.
- Zbadano i opisano metody uogólnienia modeli równowagowych oraz kinetycznych na przypadek biosorpcji wieloskładnikowej. Oprócz problemu wpływu pH poruszono także przypadek obecności w układzie kilku rodzajów jonów metali mogących wiązać się według podobnego mechanizmu.

Opracowane modele przyczyniają się do lepszego zrozumienia natury procesów rządzących zjawiskiem biosorpcji, co z kolei może mieć znaczny wpływ na kierunek badań eksperymentalnych podejmowanych w przyszłości.

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

Projekt badawczy MNiSW N N204 269038 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Maciej Szalaniec)

Celem badań prowadzonych w roku 2012 było ustabilizowanie aktywności enzymu w formie immobilizowanej co pozwoliłoby na jego aplikacyjne zastosowanie w reaktorze elektrochemicznym. Przeprowadzono również wstępne prace koncepcyjne dotyczące skonstruowania przepływowego reaktora elektrochemicznego. Ponadto zastosowano modelowanie QM:MM i MM do wyjaśnienia stereo selektywności reakcji enzymatycznej, jak również do przebadania wiązania się w centrum aktywnym nowych inhibitorów bazujących na strukturze B- i N-etyloazaboryny. Przeprowadzone badania teoretyczne skorelowano z badaniami chromatograficznymi (GC-MS i LC-MS) z selektywnie podstawionymi deuterem analogami etylobenzenu.

W ramach realizacji zadania 1 przebadano pod kątem przydatności do immobilizacji modyfikowanych materiałów celulozowych (granocele) opracowanych przez grupę dr hab. Jolanty Bryjak z Politechniki Wrocławskiej oraz nośnikach metakrylanowych opracowanych przez grupę prof. Wiktora Bukowskiego z Politechniki Rzeszowskiej. Wstępne badania wykazały, że oba typy nośników są kompatybilne z układem reakcyjnym (tj. nie powodują redukcji akceptora elektronowego). Przeprowadzone immobilizacje kowalencyjne wykazały jednak znikomy stopień wiązania się enzymu na nośniku polimerowym. Badania przeprowadzone na nośniku granocelowym wykazały duży spadek aktywności właściwej enzymu (1-13% aktywności wyjściowej) częściowo wskutek niecałkowitego wiązania się białka do powierzchni a częściowo na skutek procedury immobilizacji. Jednakże testy porównawcze trwałości wykazały zwiększoną trwałość enzymu immobilizowanego w warunkach reakcyjnych o około 30%.

W ramach realizacji zadania 2 przeprowadzono modelowanie stereoselektywności reakcji metodami QM:MM. Przebadano ścieżkę utleniania etylobenzenu zakładając aktywację pro-*S* i pro-*R* atomu wodoru oraz przeniesienie grupy OH zarówno w orientacji pro-*S* jak i pro-*R*. Przebadano również produkty powstające w przypadku reakcji z (*S*)-d1-etylobenzenem i (*R*)-d1-etylobenzenem, związkami zsyntetyzowanymi przez współpracowników w Marburgu.

Badania wykazały, że aktywacja wiązania C-H w pozycji pro-*R* jest związana z zawadą steryczną w centrum aktywnym i wiąże się z podniesieniem energii aktywacji. Natomiast przeniesienie grupy OH nie jest stereoselektywne ze względu na dłuższe wiązanie C-OH-Mo niż C-H-O. Badania izotopowe wykazały wpływ podstawienia izotopowego przy węglu benzylovym na enancjoselektywność reakcji. Wykazano powstawanie izomeru (*R*)-1-fenylotanolu w obu reakcjach, przy czym w przypadku (*S*)-1-etylobenzenu-d1 powstawał niepodstawiony izomer (*R*)-1-fenylotanol oraz mieszanina podstawionych i niepodstawionych deuterem produktów, zaś w przypadku reakcji z (*R*)-1-etylobenzenu-d1 powstawał czysty podstawiony izotopowo produkt *S* oraz mieszanina podstawionych i niepodstawionych produktów w konfiguracji *R*. Badania poparto obliczeniami QM:MM i zleconymi pomiarami VCD. Niestety wykazano zanieczyszczenie stosowanych substratów przeciwnymi formami enancjomerycznymi co uniemożliwiło jednoznaczną interpretację uzyskanych wyników QM:MM i GC-MS.

W związku z uzyskaniem obiecujących wyników immobilizacji rozpoczęto prace nad modyfikacją reaktora elektrochemicznego. Układ reakcyjny zaprojektowano w oparciu o pompę HPLC, szklaną kolumnę typu FPLC (3 ml objętości, 3 MPa), przepływową celę pomiarową do spektrofotometru oraz rurową celę elektrochemiczną wyposażoną w elektrodę utleniającą. Opracowana metoda immobilizacji pozwoli na zastosowanie enzymu w reaktorze przepływowym. Dużym osiągnięciem jest również wyjaśnienie enancjoselektywności reakcji metodami modelowania QM:MM oraz wymodelowanie wiązania nowych inhibitorów azaborynowych w centrum aktywnym enzymu.

7. Funkcjonalne nanostruktury tlenków manganu domieszkowane innymi metalami.

Projekt badawczy MNiSW 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 opracowaniu metodyki syntezy mieszanego tlenku żelazowo manganowego o strukturze spinelu oraz na badaniu właściwości katalitycznych tlenków manganu osadzonych na Pt(111). Badania katalityczne były prowadzone na tzw. odwrotnym modelowym układzie katalitycznym z wykorzystaniem reakcji miareczkowania w fazie gazowej. Badane układy zostały scharakteryzowane z wykorzystaniem dyfrakcji niskoenergetycznych elektronów (LEED), spektroskopii elektronów Augera (AES), spektroskopii fotoelektronów generowanych promieniowaniem X (XPS), spektroskopią Mössbauera z wykorzystaniem elektronów konwersji (CEMS), skaningowa mikroskopią tunelową (STM), temperaturowo programowaną desorpcją (TPD) i miareczkowaniem z wykorzystaniem analizy gazów resztkowych (RGA).

Syntezę spinelu Mn₃O₄ wykonano na epitaksjalnej warstwie Fe₃O₄(100). Zastosowanie podłoża o znanej strukturze spinelu powinno wymusić wzrost warstwy Mn₃O₄, chociaż w rzeczywistości zaobserwowano tworzenie struktury spinelu potwierdzonej badaniami LEED tylko do grubości 3 ML. Dla grubszych pokryć otrzymano strukturę MnO(100). Strukturę spinelu udało się uzyskać ponownie po zastosowaniu wygrzewania otrzymanego układu w wysokim ciśnieniu tlenu ($1 \cdot 10^{-5}$ mbar) w 820 K. Skład mieszanego spinelu był zależny od czasu wygrzewania.

Katalityczną aktywność MnO badano na podłożu Pt(111). Na platynie osadzono 0.1, 0.3, 0.5, 1.0 i 5.0 ML manganu, po czym utleniono. Analiza LEED pokazała rekonstrukcję typu (19x1) dla MnO-podobnych struktur na Pt(111). Analiza XPS potwierdziła otrzymanie MnO. Reakcję miareczkowania prowadzono dla stałego ciśnienia tlenu ($5 \cdot 10^{-7}$, $1 \cdot 10^{-6}$ i $5 \cdot 10^{-6}$ mbar) i zmiennego CO w stałej temperaturze (373, 393, 423 i 473K). Reakcja miareczkowania pokazała istnienie zakresów ciśnienia niskiej i wysokiej reaktywności CO na powierzchni układu MnO/Pt. Stwierdzono, że obecność tlenku manganu na powierzchni Pt przesunęła zakres wysokiej reaktywności w kierunku wyższych ciśnień CO. Efekt ten był znaczący i wyższy od jednego rzędu wielkości ciśnienia CO. Wielkość pokrycia tlenkiem manganu była krytyczna dla utleniania CO poniżej 0.5 ML. Obserwowany efekt zaniknął dla wyższych pokryć.

Przedstawione badania pokazały nowy sposób syntezy mieszanego tlenku żelazowo manganowego o strukturze spinelu. Sposób ten może zostać wykorzystany do otrzymania układów o specyficznych właściwościach magnetycznych i katalitycznych. Badania katalityczne wykazały pozytywną rolę niskich ilości tlenku manganu na regenerację zatrutej powierzchni Pt(111). Ta właściwość może zostać wykorzystana w syntezie aktywnych katalizatorów.

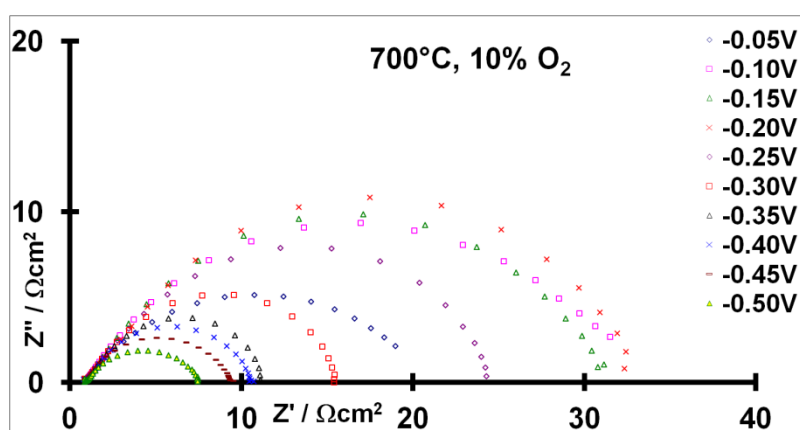
8. Kompozytowe katody do stało-tlenkowych ogniw paliwowych (SOFC) pracujące w temperaturach 600° i niższych zawierające srebro

Projekt badawczy MNiSW N N507 616638 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Michał Mosialek)

Stażo-tlenkowe wysokotemperaturowe ogniwa paliwowe (SOFCs) są obiecującymi, przyjaznymi dla środowiska źródłami energii elektrycznej o wysokiej sprawności. W ostatnich latach w całym świecie prowadzone są badania mające na celu obniżenie temperatury pracy tych ogniw do zakresu 500-700°C. Poważnym problemem ograniczającym możliwość zastosowania ogniw paliwowych tego typu jest wysoki nadpotencjał reakcji redukcji tlenu. Jednym ze sposobów rozwiązania tego problemu jest 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.

Wykonano syntezę materiału katodowego $Ba_{0,5}Sr_{0,5}Co_{0,8}Fe_{0,2}O_{3-\delta}$ (BSCF). Struktura otrzymanego związku została zbadana metodami XRD i SEM. Kontynuowano badania reakcji redukcji tlenu w układzie Ag|elektrolit tlenkowy|Ag (badane elektrolity: $Sm_{0,2}Ce_{0,8}O_{1,9}$ (20SDC), $Gd_{0,2}Ce_{0,8}O_{1,9}$ (20GDC), $Sc_{0,09}Zr_{0,8}O_{1-\delta}$ (9ScSZ), $Ce_{0,01}Sc_{0,1}Zr_{0,8}O_{1-\delta}$ (1Ce10ScSZ)). Wykonano pomiary metodą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej (ESI) i voltametrii cyklicznej. Pomiary wykonywano przy potencjale spoczynkowym oraz na elektrodzie spolaryzowanej w zakresie od -0,5V do 0,1V. Stwierdzono, że największa wartość impedancji elektrody srebrnej występuje przy potencjale -0,2V. Przy potencjałach ujemnych na widmie impedancyjnym pojawia się półkole indukcyjne a na voltamogramie pętla indukcyjna. Wykonany został zestaw do prowadzenia pomiarów elektrochemicznych w układzie dwukomorowym oraz cienkie dyski o średnicy 20 mm z elektrolitów 20SDC, $(Y_2O_3)_{0,08}(ZrO_2)_{0,92}$ (8YSZ) i 1Ce10ScSZ do prowadzenia badań w tym układzie. Opracowano metodę odlewania folii elektrolitowych i katodowych o grubościach 0,1-0,5 mm. Zmierzono impedancję porowatych elektrod otrzymanych tą metodą w układzie $O_2|La_{0,6}Sr_{0,4}Co_3|20SDC|Ag|O_2$. Otrzymano kompozytowe katody Ag/LSCF i zmierzono ich impedancję w układzie $O_2|Ag/LSCF|8YSZ|Ag|O_2$.



Rysunek 1. Widma impedancyjne elektrody srebrnej spolaryzowanej ujemnym potencjałem w układzie $O_2|Ag|20GDC|Ag|O_2$ w reprezentacji Nyquista

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

Projekt badawczy MNiSW N N204 329337 [010-2012]

(kierownik projektu: prof. 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 informacje strukturalne) obrazy dyfrakcyjne.

W ramach projektu prowadzono prace nad:

- Doposażeniem stanowiska badawczego (dyfraktometr X'pert pro mpd) w lampę Ag z zestawem filtrów, przeprowadzono testy pomiarowe. Przetestowano i dobrano parametry właściwe do posiadanego sprzętu, oraz odpowiednich programów pomiarowych i obliczeniowych.
- Podjęto badania nad wyznaczaniem parametrów sieciowych dla nietypowych preparatów, w tym preparatów o wysokiej teksturze, jak i materiałów wykazujących znaczne różnice w 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.

Wśród wykonanych badań na uwagę zasługują prace nad strukturą soli barowej kwasu azelainowego wykonane metodą 'charge flipping'. Badania przy użyciu pakietów klasycznych nie tworzyły sensownych modeli struktur. Dopiero, całościowy model struktury utworzony przy użyciu programu Superflip wskazał na poprawną grupę przestrzenną jak i na wyjątkowo duże nieuporządkowanie struktury. Prowadzono prace nad niezależną weryfikacją modeli struktur poprzez metody nie-dyfrakcyjne. Wsparciem dla metod dyfrakcji proszkowej były metody obliczeniowe, w tym metody DFT (Density Functional Theory), obliczenia tego typu prowadzono dla szeregu polimolibdenianów halogeno- bądź metylo- pochodnych aniliny. Dalsza część badań dotyczyła stabilności wyspowych oktamolibdenianów, oraz czynników warunkujących dobór danego modelu struktury. Ważnym elementem badań była też próba selekcji elementów strukturalnych odpowiedzialnych za aktywność katalityczną niektórych z badanych połączeń.

- W dalszych etapach prowadzono badania strukturalne w oparciu o formalizm PDF (pair distribution function). Ich celem było nie tylko stawianie hipotez odnośnie budowy elementów strukturalnych, ale i ilościowa weryfikacja utworzonych modeli, poprzez ich udokładnianie w sposób podobny do metody Rietvela.

Dalsze badania, mające na celu zdobycie wstępnej, startowej informacji strukturalnej, były prowadzone dla szeregu materiałów tworzonych na bazie:

- amorfizujących się tri-molibdenianów metali przejściowych (Zn i Co)
- peroksomolibdenianów osadzanych na polimerowych nośnikach.

Realizowane cele projektu można określić jako: "dostosowanie i uzupełnienie procedur pomiarowych i obliczeniowych o istotne elementy (lampa Ag, metody obliczeniowe DFT, metody Charge Flipping, mikroskopii elektronowej SEM oraz z użyciem precesującej wiązki elektronów PED, metody FTIR) pozwalające na szersze zastosowanie metod dyfraktometrii proszkowej do charakterystyki strukturalnej nowych nietypowych materiałów, w oparciu o laboratoryjne źródła promieniowania".

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

Projekt badawczy MNiSW N N204 546639 [2010-2013]

(kierownik projektu: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Głównym celem naukowym projektu jest określenie mechanizmu tworzenia i stabilności wielowarstwowych filmów polielektrolitowych zawierających kazeinę i wyznaczenie stopnia zachowania aktywności biologicznej wbudowanej kazeiny. Do budowy filmów kazeinowo-polielektrolitowych została wybrana α i β kazeina jako polianiony oraz poli-L-lizyna (PLL), poli-L-arginina (PLArg) i chitosan jako polikationy. Zgodnie z harmonogramem prac dokonano 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). W wyniku prac wykazano, że za pomocą sekwencyjnej adsorpcji polielektrolitów można tworzyć filmy kazeinowe z PLL oraz PLArg na podkładkach krzemowych (Si/SiO₂) lub sensorach kwarcowych pokrytych złotem natomiast nie uzyskano stabilnych filmów chitosanowo-kazeinowych. Filmy kazeinowo-argininowe wykazywały dużo większe grubości w stosunku do warstw kazeinowo-poli-L-lizynowych. Nie udało się uzyskać filmów kazeinowo-chitosanowych grubszych niż 6 nm ze względu na bardzo słabą adsorpcję chitosanu

W wyniku przeprowadzonych badań zauważono, że najgrubsze filmy (PLArg/kazeina)_n oraz (PLL/kazeina)_n tworzą się przy sile jonowej I=0.15 M NaCl. Filmy (PLArg/kazeina)_n oraz (PLL/kazeina)_n nie były odporne na traktowanie roztworami o pH 2, gdyż w tych warunkach ładunek kazeiny zmieniał się na dodatni. Filmy (PLL/kazeina)_n okazały się także niestabilne w warunkach pH 11 z powodu neutralizacji PLL natomiast filmy z PLArg w warunkach zachowały stabilność. Zaobserwowano tylko nieznaczne zmiany grubości tych filmów po traktowaniu ich roztworami o pH 11. W warunkach naturalnych filmy zawierające α -kazeinę były bardziej stabilne niż te zawierające β -kazeinę.

Wielowarstwowe filmy (PLL/kazeina)_n i (PLArg/kazeina)_n traktowane były również roztworami NaCl (o stężeniach 0.15 M, 0.75 M, 1.5 M), HEPES oraz CaCl₂ (o stężeniach 2 mM, 5 mM, 20 mM i 50 mM). Wyniki pomiarów elipsometrycznych oraz QCM-D pokazały, że filmy (PLArg/kazeina)_n są odporne na działanie soli, natomiast filmy (PLL/kazeina)_n w wyniku traktowania ich solami o wysokim stężeniu (1.5 M NaCl) zmywały się z powierzchni płytek.

Moczenie płytek z filmami (PLL/kazeina)_n i (PLArg/kazeina)_n w roztworach CaCl₂ powodowało adsorpcję jonów wapniowych. Przeprowadzone analizy pomiarów FTIR oraz XPS pokazały, że zarówno filmy kazeinowe z PLL jak i z PLArg zawierały związane z białkiem jony wapniowe. Wskazywałoby to na zachowanie aktywności biologicznej kazeiny po jej wbudowaniu w warstwę polielektrolitowe.

Pomiary FTIR pokazały także, że w wyniku adsorpcji kazeiny w warstwach polielektrolitowych, następuje pewne ustrukturyzowanie łańcuchów białka, gdyż w widmie podczerwieni dla kazeiny zaadsorbowanej na płytkach krzemowych obserwujemy przesunięcie maksimum pików, widocznych dla kazeiny w roztworze, wskazujące na pojawienie się struktur α helisy.

Uzyskane wyniki dają nam pogląd na zachowanie się filmów polielektrolitowo-kazeinowych w różnych warunkach fizykochemicznych. Będą wykorzystane do dalszych badań struktury łańcuchów kazeinowych w warstwach polielektrolitowych zaadsorbowanych na powierzchniach stałych.

11. Badania struktury i właściwości magnetycznie sterowanego nanopojemnika molekularnego

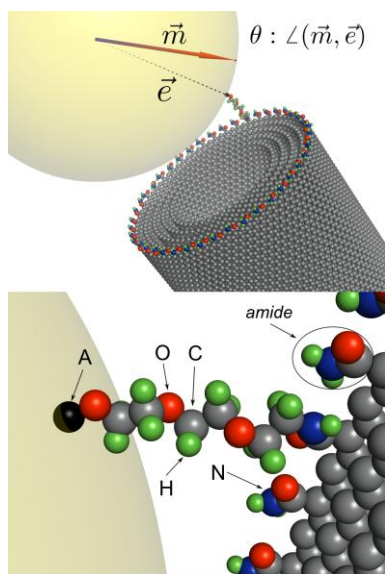
Projekt badawczy MNiSW N N204 205240 [2011-2014]
 (kierownik projektu: dr hab. Tomasz Pańczyk prof IKiFP)

Przeprowadzono badania właściwości układu złożonego z wielościennnej nanorurki węglowej do której przyłączone zostały nanocząstki magnetyczne poprzez łańcuchy glikolu trójetylenowego (Rys. 1). Badania miały na celu określenie wpływu wartości bariery anizotropii magnetycznej nanocząstek magnetycznych na zjawisko magnetycznego odkorkowania nanorurki węglowej.

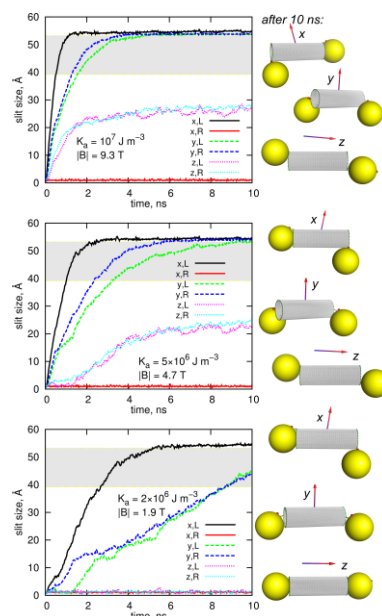
W tym celu opracowano model i pole siłowe pozwalające na badania tego zjawiska przy użyciu dynamiki molekularnej. Mechanizm odwracania magnetyzacji pod wpływem zewnętrznego pola magnetycznego oraz sprzężenie go ze standardową dynamiką newtonowską opierał się na wykorzystaniu modelu Neela-Browna oraz dynamiki Langevina. Założono przy tym, że proces odwracania magnetyzacji zachodzi według mechanizmu rotacji koherentnej z zachowaniem wartości modułu magnetyzacji. W oparciu o powyższe założenia teoretyczne zaimplementowano dodatkowe klasy dla kodu dynamiki molekularnej lammps.

Kluczowe wyniki uzyskane na tym etapie badań dotyczą: profilu energetycznego nanopojemnika towarzyszącemu transferowi nanocząstki magnetycznej ze stanu zamkniętego do otwartego, zakresu wartości stałej anizotropii magnetycznej, w którym magnetyczne wyzwalały transfer zachodzi w czasach rzędu 10 ns, zakresu wartości natężenia pola magnetycznego, dla którego obserwuje się proces odkorkowania nanorurki, jak też innych efektów, jak np. magnetycznego rozgrzewania układu.

Uzyskane wyniki potwierdzają potencjalną użyteczność rozważanego układu w dziedzinie nanomedycyny jako nośnika leków o zdolności do wyzwalaania procesu uwalniania leku pod wpływem oddziaływania z zewnętrznym polem magnetycznym. Proces odkorkowania nanorurki jest bardzo szybki i w znacznym stopniu zależy od wzajemnej orientacji osi nanorurki i kierunku pola magnetycznego. Rys. 2 przedstawia typowe zależności stopnia otwarcia nanorurki w funkcji czasu, natężenia pola oraz wartości bariery anizotropii K_a .



Rysunek 1. Struktura nanopojemnika. Oznaczenia: \vec{m} - wektor magnetyzacji, \vec{e} - wektor osi łatwej

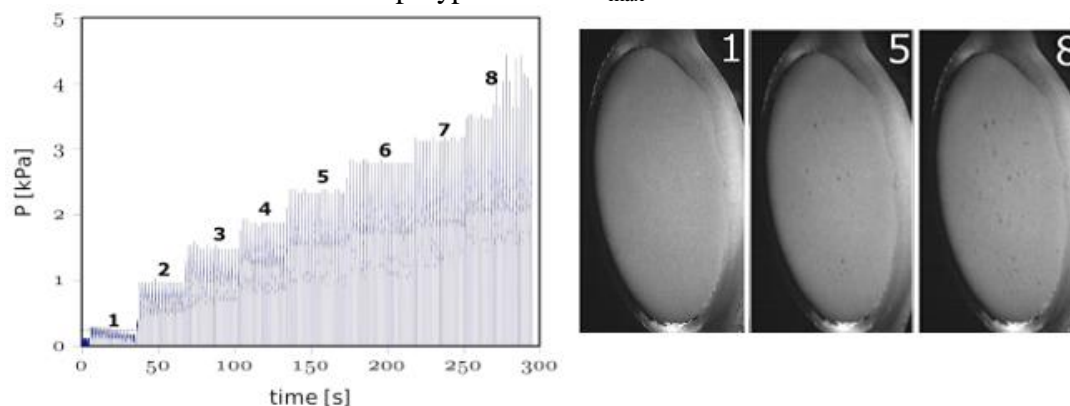


Rysunek 2. Ewolucja czasowa struktury nanopojemnika wyrażona jako stopień otwarcia w funkcji czasu

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

Projekt badawczy MNiSW N N204133640 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Celem projektu jest zbadanie wpływu (i) zdefiniowanej szorstkości powierzchni ciała stałego oraz (ii) obecności sub-mikronowych pęcherzyków powietrza na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (TPC) ciecz/gaz/ciało stałe. W okresie sprawozdawczym badano kinetykę powstawania TPC podczas kolizji pęcherzyka z płytkami Teflonowym o różnej szorstkości w α -terpineolu i *n*-oktanolu (spieniacze) o wysokim stężeniu. Ruch pęcherzyka o promieniu $R_b=0.74$ mm oraz jego zderzenia z powierzchnią i tworzenie TPC monitorowane było przy użyciu szybkiej kamery cyfrowej. Odległość pomiędzy punktem formowania się pęcherzyka (otworem kapilary) a powierzchnią międzyfazową ustawiona była tak, aby pęcherzyk uderzał w powierzchnię z prędkością graniczną (~ 15 cm/s). Na podstawie analizy zarejestrowanych filmów otrzymano dodatkowy dowód potwierdzający zjawisko przedłużania czasu powstawania TPC (t_{TPC}) w roztworach surfaktantów. W roztworach α -terpineolu i *n*-oktanolu o stężeniu $1 \cdot 10^{-3}$ M zaobserwowano spektakularny efekt wydłużenia t_{TPC} nawet o 70 ms (ponad rząd wielkości) w porównaniu z czasem w czystej wodzie. Wyniki te potwierdziły hipotezę, iż że efekt wydłużenia t_{TPC} związany jest z obecnością powietrza na powierzchni ciała stałego. Większa stabilność lokalnych filmów pianowych powstających pomiędzy "uwięzionym" pod powierzchnią Teflonu powietrzem (sub-mikronowe pęcherzyki) a uderzającym w powierzchnię makro-pęcherzykiem jest odpowiedzialna za wydłużenie t_{TPC} . W okresie sprawozdawczym, stosując zestaw umożliwiający kontrolowanie nadciśnienia (*P*) w układzie, wykonano zdjęcia porowatych powierzchni szklanych (spieków) zanurzonych w wodzie dla różnych wartości *P*. Wykonano także ciśnieniowe charakterystyki spieków, mające na celu określenie ilości i wielkości mikro-pęcherzyków tworzących się na tych powierzchniach w funkcji wielkości przyłożonego *P*. Rys. 1 przedstawia wybraną zależność *P* w funkcji czasu, oraz, odpowiadające trzem wartościom *P*, zdjęcia powierzchni spieków. Jak można zaobserwować, na powierzchni tworzą się mikroskopijne pęcherzyki, których ilość i wielkość jest proporcjonalna do wartości *P*. Korelację obliczono na podstawie analizy obrazów. Stwierdzono, że wraz ze wzrastającym *P* w zakresie od 0 do $P_{max}=4$ kPa wielkość pojawiających się pęcherzyków rośnie, obejmując większy zakres, tzn. zmienia się z przedziału 20-200 μm do 20-700 μm . Ponadto wartość pokrycia powierzchniowego rośnie z 0% dla $P = 0$ do około 2% w przypadku $P = P_{max}$.



Rysunek 1. Nadciśnienie w funkcji czasu oraz odpowiadające konkretnym wartościom *P* zdjęcia powierzchni spieków szklanych, z widocznymi, tworzącymi się mikro-pęcherzykami

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

Projekt badawczy MNiSW N N204 439640 [2011-2014]

(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Celem niniejszego projektu jest zbadanie mechanizmu transmetalacji porfiryny magnezu i jej wybranych pochodnych (chloryny, chlorofilu) jonami miedzi(II) i cynku(II). Z jednej strony umożliwia poznanie procesu wymiany magnezu w chlorofilu jonami metali ciężkich (głównie Cu(II)), który zachodzi w roślinach rosnących na zanieczyszczonych glebach, z drugiej zaś jest jedną z metod otrzymywania metaloporfiryn z różnymi metalami centralnymi.

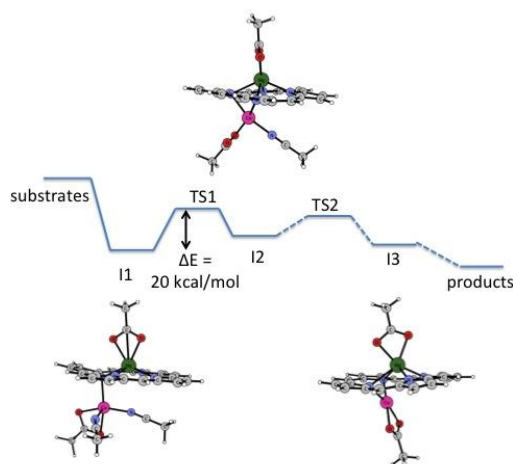
Przedstawione badania wykonano kwantowo-chemiczną metodą DFT (Teoria Funkcjonałów Gęstości) przy użyciu nielokalnego funkcjonału Becke-Perdew z zastosowaniem przybliżenia R_i , zaimplementowanego w programie Turbomole. Badane procesy scharakteryzowano za pomocą parametrów geometrycznych (długości wiązań,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

Kontynuowano badania nad mechanizmem wymiany magnezu na jon drugiego metalu. Określono struktury geometryczne i elektronowe produktów pośrednich, które pojawiają się w trakcie zachodzenia reakcji.

Pierwszym etapem badanej reakcji jest aktywacja kompleksu MgP, która następuje poprzez wymianę liganda aksjalnego magnezu (tu: acetonitrylu - ACN) przez jon octanowy, co powoduje znaczną deformację pierścienia porfirynowego i wyciągnięcie jonu Mg^{2+} nad płaszczyznę cząsteczki. W ten sposób możliwe jest eksponowanie atomów azotów z porfiryny, których charakter nukleofilowy ulega wzmocnieniu, co manifestuje się zwiększeniem zgromadzonego na nich ujemnego ładunku (średnio z -0.28 do -0.63). Atomy te stanowią miejsce ataku elektrofilowego jonu drugiego metalu (miedzi lub cynku).

Dalsza reakcja przebiega poprzez desolvatację Cu lub Zn. Wymodelowano zatem układy bimetaliczne: $(CH_3COO)MgPCu(ACN)_n$ gdzie $n = 3, 2, 1$ oraz $(CH_3COO)MgPCu(CH_3COO)(ACN)_n$ gdzie $n = 2, 1$. Wraz ze zmniejszeniem liczby cząstek acetonitrylu następuje stopniowe wbudowanie

się jonu miedzi w strukturę pierścienia porfirynowego. Oddysocjowanie jonu magnezu następuje, gdy jon miedzi zostanie desolvatowany.



Rysunek. Schematyczny profil badanej reakcji transmetalacji.

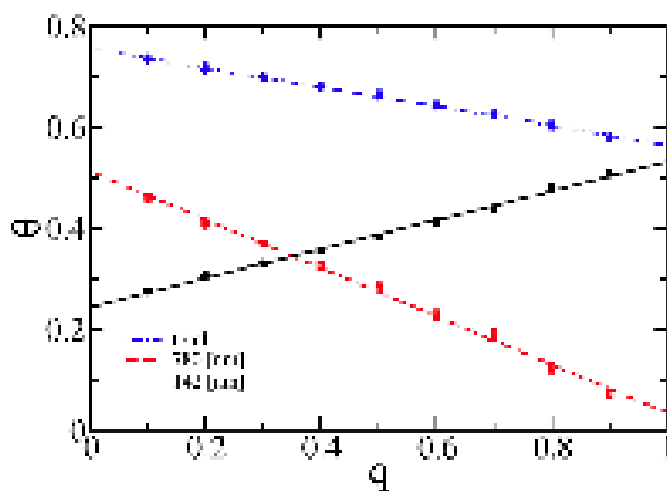
14. Nowe układy multiwarstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności

Projekt badawczy MNiSW N N204 439040 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr inż. Jakub Barbasz)

Projekt realizowany jest zgodnie z harmonogramem. Przygotowano i wykonano eksperymenty adsorpcji równoległej dla cząstek o dwóch rozmiarach. Powstałe w wyniku adsorpcji równoległej warstwy analizowano z użyciem mikroskopii sił atomowych, optycznej oraz mikroskopii elektronowej. Uzyskane wyniki posłużyły do wyznaczenia pokryć maksymalnych.

Rozwijano także model adsorpcji równoległej poprzez przygotowanie modelu kinetycznego. Określono kinetyki adsorpcji cząstek oraz wykonano odpowiadające im symulacje.



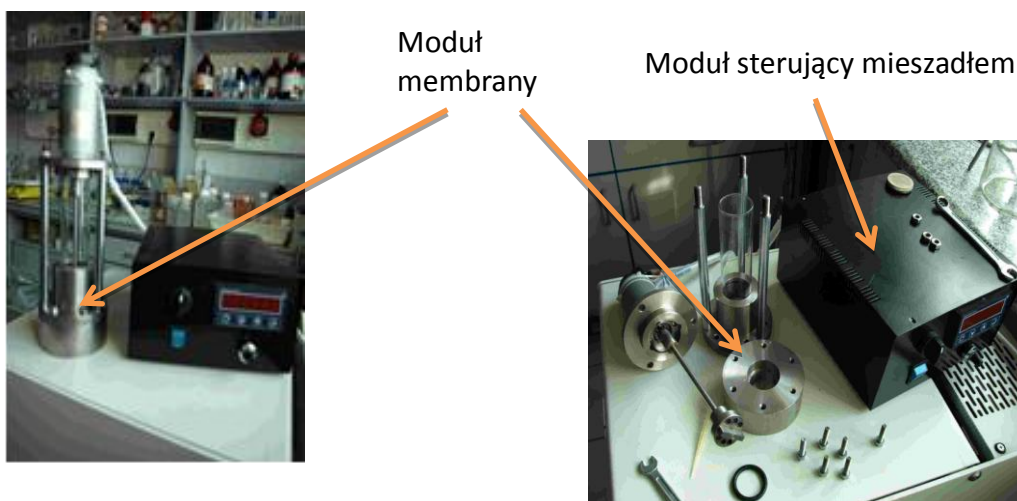
Rysunek 1. Pokrycia maksymalne w zależności od stosunku stężeń cząstek dużych i małych

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

Projekt badawczy MNiSW N N209 757340 [2011-2014]
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych efektywnej techniki 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. Powinno to 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 2012 roku skupiliśmy się na kolejnym zadaniu projektu dotyczącym zaprojektowania i budowy nowego emulsyfikatora membranowego. Zbudowany zestaw składa się z pompy, modułu z membraną oraz mieszadła. Zestaw charakteryzuje się możliwością kontroli wszystkich parametrów mających wpływ na własności otrzymanej emulsji (między innymi: przepływ fazy olejowej przez membranę (pompa), wielkość siły ścinającej (mieszadło)). Zdjęcia wykonanej instalacji przedstawione są na Rysunku 1. Zestaw wyposażono w wymienne membrany o średnicy porów 80 nm, 100 nm, 200 nm oraz 4 μm . Przeprowadzono wstępne testy wybudowanego emulsyfikatora membranowego. Badano wpływu szybkości napływu fazy olejowej na wielkość powstałej kropli. Otrzymane wyniki są zgodne z przewidywaniami modelu teoretycznego opracowanego we wcześniejszej fazie projektu.



Rysunek 1. Zdjęcia wybudowanego zestawu do emulsyfikacji membranowej

W kolejnym etapie skonstruowany zestaw będzie służył do otrzymania mikrokapsulek z powłoką polielektrolitową, dla transportu wybranych modelowych substancji aktywnych (leki, związki antykorozyjne, barwniki fluorescencyjne).

PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE (MNiSW)

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

Projekt badawczy promotorski MNiSW N N204 179439 [2010-2012]

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

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

W 2012 roku doktorantka - p. mgr inż. Anna Niecikowska - urodziła córkę, przebywała na rocznym urlopie macierzyńskim i dlatego zaplanowane badania i zakończenie grantu zostały przeniesione na 2013 r, za zgodą NCN.

2. Odpowiedź strukturalna zapraw z cementów romańskich na wysychanie

Projekt badawczy promotorski N N105 429140 [2011-2012]

(promotor: prof. 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, było porównanie odpowiedzi strukturalnej na wysychanie dla kilku spoiw mogących mieć zastosowanie w pracach konserwatorskich. Zakończono również badania przy użyciu mikroskopii optycznej oraz SEM.

Badania skupiły się na aktualnie produkowanych cementach romańskich pochodzących z margli wydobywanych w Polsce (Folwark) i Austrii (Gartenau i Wietersdorfer & Peggauer), francuskim cemencie naturalnym (Prompt) oraz naturalnym wapnie hydraulicznym (NHL 5) i objęły zaczyny (materiały bez kruszywa) oraz zaprawy normowe (materiały z dodatkiem kruszywa). Ze względu na konieczność odpowiedniego wydłużenia czasu zachowania właściwości roboczych materiałów z cementów romańskich zastosowano dwa sposoby opóźniania wiązania, tj. chemiczne opóźnienie oraz dodanie niewielkiej ilości wody deaktywującej część faz hydraulicznych cementu. Składy zaczynów i zapraw charakteryzowały się podobnymi rozlewnościami umożliwiającymi, odpowiednio, wykonanie odlewów detali architektonicznych lub elewacyjnych wypraw tynkarskich.

Zagrożenie materiałów spękaniami określono przez porównanie skurczu wysychania i wydłużenia krytycznego. W zasadzie dla wszystkich materiałów z cementów romańskich końcowe wartości skurczu wysychania przewyższały wydłużenie krytyczne. Stąd materiały z cementów romańskich są generalnie zagrożone spękaniami w trakcie wysychania. W szczególności dotyczy to zaczynów z cementów romańskich. Zagrożenie powstawaniem spękań jest najmniejsze dla krótko pielęgnowanych zaczynów z cementów Prompt i Folwark. Z kolei zagrożenie spękaniami jest znacznie niższe w zaprawach bogatych w kruszywo. W takich materiałach wysokie zagrożenie powstaniem spękań wystąpiło jedynie dla krótko pielęgnowanych zapraw z austriackich cementów, których wiązanie opóźniono przez częściową deaktywację cementu. Ponieważ z czasem pielęgnacji obniżał się skurcz wysychania oraz rosły parametry mechaniczne materiałów z naturalnego wapna hydraulicznego NHL 5, wskazana jest ich długa pielęgnacja, aby ograniczyć zagrożenie spękaniami. Badania mikroskopowe pokazały, że większość spękań przechodzi przez matrycę cementową wzdłuż niezhydratyzowanych ziaren cementu i ziaren kruszywa. Jedynie dla materiałów o dojrzałej strukturze matrycy cementowej część spękań przebiega przez niezhydratyzowane ziarna cementu.

PROJEKTY BADAWCZE "SONATA" (NCN)

1. Wpływ ogrzewania zabytkowych kościołów na przenoszenie i osadzanie pyłów

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/01/D/HS2/02604 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Marcin Strojecki)

Projekt badawczy realizowany jest w ramach konsorcjum naukowego we współpracy z Narodowym Instytutem Muzealnictwa i Ochrony Zabytków w Warszawie. Celem projektu jest szczegółowe rozpoznanie wzmożonych przepływów ciepła, pyłów oraz wilgoci pojawiających się przy różnych strategiach ogrzewania zabytkowych kościołów i dla różnych systemów grzewczych.

Realizacja projektu przebiega zgodnie z zaplanowanym harmonogramem. Wstępne testy laboratoryjne polegające na sprawdzeniu i kalibracji zakupionych laserowych czujników zapylenia zostały zakończone. Analiza uzyskanych wyników pokazała bardzo dobrą zgodność pomiaru wykonanego przy użyciu tych czujników z pomiarami wykonanymi przy użyciu standardowych impaktorów kaskadowych. Otrzymane współczynniki korelacji 0.99 oraz 0.95 odpowiednio dla frakcji wielkościowej 0.3-1.0 μm oraz powyżej 1.0 μm , świadczą o wysokiej wiarygodności zakupionych czujników.

Drugi etap realizacji projektu polegający na instalacji oraz długoczasowym monitorowaniu warunków mikroklimatycznych w 5 wybranych kościołach (w pierwszym roku trwania projektu) został poprzedzony wstępnymi długookresowymi badaniami. Polegały one na instalacji bardzo rozbudowanego systemu monitorowania w dwóch kościołach wyposażonych w różne systemy grzewcze oraz sprawdzeniu w rzeczywistych warunkach w jaki sposób planować i prowadzić takie pomiary w innych obiektach.

Pierwszy system składający się z 6 czujników zapylenia, 5 czujników temperatury i wilgotności względnej powietrza (T/RH), 1 czujnika temperatury powierzchni stropu, 1 czujnika prędkości i kierunku ruchu powietrza oraz 1 czujnika stężenia CO_2 został zainstalowany w marcu 2011 r. w murowanym XIII-wiecznym kościele p.w. Wniebowzięcia NMP i św. Wacława w Krakowie-Mogile z ogrzewaniem nadmuchowym z posadzki. Drugi system składający się z 7 czujników zapylenia, 4 czujników T/RH powietrza, 1 czujnika prędkości i kierunku ruchu powietrza oraz 1 czujnika stężenia CO_2 zainstalowano w XV-wiecznym drewnianym kościele pw. św. Bartłomieja Ap. W Krakowie-Mogile wyposażonym w ogrzewanie podławkowe. Czujniki zostały rozmieszczone zarówno w profilu horyzontalnym jak i wertykalnym, tak aby sprawdzić czy istnieją różnice w rozkładzie pyłu zawieszonego we wnętrzu całego kościoła. Czujniki mierzące stężenie CO_2 zostały zainstalowane w celu wyznaczenia szybkości wymiany powietrza wewnętrznego z zewnętrznym oraz pośrednio do oszacowania ilości wiernych nawiedzających świątynie. Dodatkowo na dzwonnicy znajdującej się w pobliżu obu kościołów zainstalowano 1 czujnik mierzący zapylenie zewnętrzne oraz 1 czujnik T/RH mierzący temperaturę i wilgotność względną powietrza zewnętrznego, tak aby mieć punkt odniesienia do zewnętrznych warunków.

Analiza wyników uzyskanych w trakcie 9-miesięcznego monitorowania dostarczyła informacji zarówno na temat rozkładów przestrzennych pyłu zawieszonego we wnętrzach obu kościołów jak i ich warunków mikroklimatycznych. Otrzymane wyniki świadczące o dość jednorodnym rozkładzie przestrzennym pyłu zawieszonego umożliwiły optymalizację układu monitorowania polegającą na zredukowaniu liczby czujników potrzebnych do prowadzenia wiarygodnych pomiarów. Dzięki temu można było zwiększyć liczbę monitorowanych kościołów i tak obecne pomiary prowadzone są w sumie w 7 kościołach.

Równoległe z długookresowym monitorowaniem prowadzone są krótkookresowe pomiary (ok. tygodnia) przy użyciu monitora stężenia aerozolu DustTrak DRX 8533(TSI), który mierzy wagową zawartość pyłu w 5 frakcjach wielkościowych: PM1, PM2.5, PM4, PM10 oraz TPM (całkowita ilość pyłu). Dodatkowo, osadzony na filtrze pył oraz makroskopowe próbki kurzu pobrane z różnych lokalizacji w monitorowanych kościołach poddawane są szczegółowej analizie chemiczno-morfologicznej.

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

Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/01/D/ST5/04917 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Monika Góral-Kurbiel)

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

Badania przeprowadzone w 2012 roku obejmowały syntezę i charakteryzację właściwości fizykochemicznych katalizatorów palladowych oraz badanie ich elektroaktywności w ORR. Celem uzyskania dobrze zdefiniowanych nanocząstek Pd, ich synteza została przeprowadzona metodą mikroemulsji odwróconej (*ang. water-in-oil microemulsion*). Podstawą tej metody jest formowanie cząstek metalicznych "w kropli" fazy wodnej, co warunkuje wąski zakres wielkości krystalitów metalu. Tak uzyskane 5-8 nm cząstki palladu zostały osadzone w matrycy PPY. Ten przewodzący polimer otrzymano w wyniku chemicznej polimeryzacji w kwaśnym środowisku wodnym, z nadsiarczanem amonu zastosowanym jako utleniacz. Zsyntetyzowano katalizatory o różnej zawartości palladu od 2 do 20% (w/w). Charakteryzowano je metodami BET, XRD, XPS, IR oraz SEM. Określono także aktywność elektrokatalityczną tych materiałów w reakcji ORR 0.5 M H₂SO₄ przy użyciu wirującej elektrody dyskowej z pierścieniem oraz woltamperometrii cyklicznej.

Uzyskane wyniki pokazały, że aktywność badanych katalizatorów w reakcji ORR rosła wraz ze wzrostem zawartości palladu, a potencjał redukcji tlenu przesunął się w stronę dodatnich wartości aż do pewnej optymalnej zawartości metalu, tj. ok. 10% (w/w). Przy większych zawartościach palladu nie obserwowano już dalszego wzrostu aktywności w ORR. Obserwowana elektroaktywność katalizatorów Pd/PPY była wynikiem szeregu efektów, takich jak: agregacja cząstek palladu (jak pokazały badania mikroskopowe) i ich penetracja w głąb matrycy polimeru (badania XPS). Wzrost zawartości palladu powodował również wzrost selektywności w kierunku pożądanego produktu - wody.

Przeprowadzone badania miały charakter badań podstawowych, nie mniej uzyskanie nowych efektów (np. wpływ dyspersji i zawartości metalu) może przyczynić się do lepszego poznania czynników odpowiedzialnych za aktywność i dezaktywację katalizatorów w reakcji elektrodukcji tlenu. W efekcie można oczekiwać wpływu uzyskanych wyników na praktyczne zastosowanie badanych układów w ogniwach paliwowych.

3. Funkcjonalizacja filmów polimerowych jako narzędzie do otrzymywania nowoczesnych nanomateriałów o znacznym potencjale aplikacyjnym

Projekt badawczy "Sonata" NCN UMO-2011/01/D/ST5/04913 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Marta Kolasińska-Sojka)

Celem naukowym projektu jest funkcjonalizacja filmów polimerowych za pomocą wybranych nanoobjektów oraz zbadanie wpływu struktury i właściwości powierzchniowych zaprojektowanych nanokompozytów na ich potencjalne zastosowanie w dziedzinie nowoczesnych materiałów o złożonych funkcjach. Nanokompozyty są otrzymywane techniką sekwencyjnej adsorpcji przeciwnie naładowanych polielektrolitów i/lub nanocząstek bądź liposomów z roztworów. Jako nanocząstki używane są hydrofilowe nanocząstki złota, srebra, oraz kropki kwantowe. Kropki kwantowe charakteryzują się szerszym pasmem absorpcyjnym i węższym pasmem emisji fluorescencji i wielokrotnie wyższą stabilnością niż tradycyjne barwniki fluorescencyjne. Ponieważ w postaci niezmodyfikowanej są toksyczne dla tkanek muszą być dostarczane we wnętrzu liposomów lub nanokapsułek tworzonych z biokompatybilnych materiałów. Ponadto są trwalsze w postaci hydrofobowej, co może mieć kluczowe znaczenie w przypadku ich zastosowania jako markerów fluorescencyjnych.

W dotychczasowych pracach skupiono się na charakterystyce filmów polielektrolitowych wytworzonych z biokompatybilnych komponentów (PLL/PGA) i porównaniu ich z analogicznymi wielowarstwami, zbudowanymi z syntetycznych polielektrolitów (PAH/PSS, PDADMAC/PSS). Zaobserwowano, iż w przypadku filmów PLL/PGA istnieje możliwość takiego doboru warunków tworzenia (pH roztworów polielektrolitów), że otrzymane struktury charakteryzują się eksponencjalnym wzrostem zarówno grubości, jak i masy. Dodatkowe elektrochemiczne badania przepuszczalności pozwoliły wykazać, że takie multiwarstwy, choć znacznie grubsze, praktycznie nie ograniczają dyfuzji wybranych składników elektroaktywnych przez swoją objętość, co świadczy o ich bardzo "porowatej" strukturze. Należy mieć to na uwadze przy projektowaniu kapsułek polielektrolitowych, które mogą być stosowane w układach do kontrolowanego uwalniania składników aktywnych.

Kolejne z realizowanych zadań dotyczyło optymalizacji tworzenia biwarstw lipidowych na powierzchni filmów polielektrolitowych. Badania te wykonano przy użyciu mikrowagi kwarcowej. Dla wybranego układu lipidów (SOPC:SOPS) obserwowano powtarzalne tworzenie biwarstwy przy zastosowaniu się do pewnych ograniczeń, tj. stężenie użytych liposomów nie może być wyższe niż 0.05 mg/ml przy jednoczesnej kontroli temperatury (powyżej temperatury przejścia fazowego dla danych lipidów). Wykonano również wstępne badania zamknięcia hydrofobowych kropek kwantowych w apolarnych częściach liposomów. Obecność kropek kwantowych w liposomach została potwierdzona poprzez rejestrację ich widm emisyjnych za pomocą fluorymetru. Obecne prace skupiają się nad optymalizacją tworzenia biwarstw z tak zmodyfikowanych liposomów, ponieważ mają one tendencję do osadzania się na powierzchni filmów polielektrolitowych w postaci pęcherzyków.

Ponadto zoptymalizowano warunki tworzenia filmów nanokompozytowych zbudowanych z wybranych polikationów oraz ujemnie naładowanych nanocząstek złota i srebra. W badanych przypadkach obserwowano liniowy przyrost zaadsorbowanej masy wraz ze wzrostem ilości warstw tworzących wielowarstwę.

4. Dynamika zmian konformacyjnych w pierścieniach piranozowych: modelowanie komputerowe

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

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

Celem było szczegółowe zbadanie dynamiki oraz termodynamiki przejść konformacyjnych (typu krzesło ${}^1C_4 \leftrightarrow$ krzesło 4C_1) w cząsteczkach wybranych cukrów, zbudowanych z sześcioczłonowych pierścieni (piranoz). Przejścia tego typu są niezwykle ważne w procesach glikobiologicznych ale, ze względu na fakt, że są obserwowane w skali mikrosekund, trudno je badać zarówno metodami eksperymentalnymi, jak i symulacyjnymi.

Z uwagi na długi czas oczekiwania na wystąpienie pojedynczego przejścia konformacyjnego (mikrosekundy), standardowa dynamika molekularna (MD) jest w tym wypadku mało wydajną metodą, z uwagi na niewielką ilość przejść, jakie można zaobserwować w realnym czasie. W celu zebrania dostatecznie dużej ilości danych, połączono technikę MD z metodą *Transition Path Sampling* (TPS). Ponadto, zastosowano metodę REMD (*replica-exchange molecular dynamics*) w celu ustalenia profili energii swobodnej odpowiadającej ww. przejściu konformacyjnemu.

Otrzymano szereg profili energii swobodnej odpowiadających przejściu ${}^1C_4 \leftrightarrow$ 4C_1 m.in. dla następujących węglowodanów: α - i β -D-glukoza, α - i β -D-idoza, α - i β -D-taloza, α - i β -D-altroza. Konformacja 4C_1 jest najbardziej stabilna (tj. korzystna energetycznie) w niemal każdym przypadku (z wyjątkiem α -D-idozy). Ponadto, zmodyfikowano algorytmy metody TPS w celu optymalnego podejścia do analizy przejść konformacyjnych w sześcioczłonowych pierścieniach (m.in. zastosowano tzw. *shooting point bias*).

Wyniki stanowią istotny wkład do zrozumienia mechanizmów zmian konformacyjnych w pierścieniach węglowodanów na poziomie molekularnym. Ponadto, zmodyfikowane algorytmy TPS mogą zostać użyte do badań przejść konformacyjnych innego typu w zbliżonych właściwościami układach.

5. Wcelowane dostarczanie leków-synteza i funkcjonalizacja nanonośników

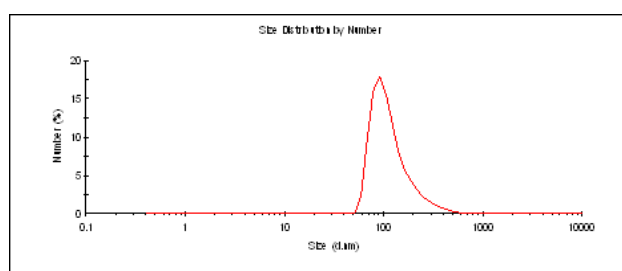
Projekt badawczy "Sonata" NCN 2011/03/D/ST5/05635 [2012-2017]

(kierownik projektu: dr Krzysztof Szczepanowicz)

Nanokapsułki mogą być stosowane w specyficznych systemach dostarczania leków, ponieważ mogą one mieć zdolność przenikania przez błonę komórkową, ponadto, mogą one być specyficznie sfunkcjonalizowane, co pozwoli na osiągnięcie tzw. „*intelligent targeting*”, czyli uwalnianie leku w odpowiednim miejscu i czasie w organizmie, 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.

Celem niniejszego projektu jest opracowanie podstaw naukowych metod enkapsulacji terapeutyków w specyficznie sfunkcjonalizowanych nanonośnikach, wykazujących zwiększone powinowactwo do ściśle określonych miejsc na przykład do receptorów występujących na powierzchni chorobowo zmienionych komórek. Postawiony cel badawczy zostanie osiągnięty w kilku podstawowych krokach. Pierwszym z nich będzie opracowanie metody enkapsulacji związków aktywnych różnymi metodami. Następnie otrzymane kapsułki zostaną sfunkcjonalizowane w celu osiągnięcia wcelowanego dostarczania leku tzw. "inteligentnego dostarczanie", czyli dostarczanie leku tylko do określonych miejsc, komórek lub narządów. Ostatnim krokiem będą testy biologiczne mające za zadanie zbadanie cytotoksyczności otrzymanych nośników oraz zweryfikowanie selektywnego działania przygotowanych kapsułek w modelu komórkowym. Prace prowadzone będą jednocześnie w dwóch ośrodkach posiadających odpowiednie doświadczenie oraz zaplecze sprzętowe niezbędne w tego typu badaniach: w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN oraz na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego.

W 2012 roku skupiono się na preparatyce nanonośników zawierających nowe czynniki antyrakowe (Taxol, Dpm44T). Nanokapsułki otrzymano metodą opracowaną w naszym laboratorium, tj. w bezpośredniej enkapsulacji kropli emulsyjnej w powłokach polielektrolitowych. Otrzymano emulsje o średnim rozmiarze kropelek 100 nm zawierające antynowotworowe czynniki aktywne. Krople te następnie zamykano w powłokach polielektrolitowych techniką warstwa po warstwie metodą nasyceniową. Rysunek 1 przedstawia średni rozmiar nanokapsułek z pięcioma warstwami PLL/PGA.



Rysunek 1 Rozkład wielkości polielektrolitowych kapsułek AOT(PLL/PGA)₅ zawierających związek Dpm44T

PROJEKTY BADAWCZE "OPUS" (NCN)

1. Mechanizm zniszczeń obrazów panelowych z uwzględnieniem struktury przyrostów rocznych drewna i rzeczywistych fluktuacji klimatu

Projekt badawczy "Opus"NCN UMO-2001/01/B/HS2/02586 [2011-2014]
(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)

Do najpoważniejszych zagrożeń polichromii na drewnie należą niekontrolowane fluktuacje wilgotności względnej i temperatury powodujące naprężenia w wielowarstwowym układzie drewna, kleju, zaprawy i powłok malarskich, które prowadzą do uszkodzeń fizycznych poszczególnych materiałów. Projekt jest kolejnym krokiem w precyzyjnym ustaleniu dopuszczalnych fluktuacji parametrów powietrza, podejmującym szerokie badania nad zjawiskiem zmęczenia warstw polichromii na drewnie tj. zniszczeń wynikających z wielokrotnego zachodzenia cykli odkształcenia materiału nawet poniżej granicy plastyczności.

Wstępne badania procesów zmęczeniowych zaowocowały wyznaczeniem krzywych zmęczeniowych dla warstwy polichromii na drewnie, czyli zależności między odkształceniem prowadzącym do pierwszego pęknięcia warstwy, a liczbą cykli odkształcających to pęknięcie wywołujących. W następnym kroku, przy pomocy modelowania komputerowego, oceniono wielkość zmian wilgotności względnej w otoczeniu powodujących odkształcenia krytyczne. Te pionierskie badania pokazały kluczowe znaczenie zjawisk zmęczeniowych w procesie powstawania uszkodzeń warstwy polichromii na drewnie i wskazały na konieczność przyjęcia „dawki” cykli odkształceń jako miary kumulacyjnego zagrożenia dla polichromii. Dotyczyły one jednak jedynie pierwszego etapu tego procesu, a mianowicie powstawania pierwszych pęknięć na jednorodnej, nieuszkodzonej warstwie zaprawy. Tymczasem, rzeczywiste zabytkowe polichromie na drewnie są niemal zawsze spękane, jak również posiadają obszary odspojen od podłoża. Często obserwuje się stabilizację układów spękań i odspojen wywoływanych przez wpływ tego samego otoczenia. Zjawisko to opisuje się jako „adaptację”, czy „aklimatyzację” obiektów do warunków mikroklimatycznych, w jakich są przechowywane.

W pierwszym roku projektu przeprowadzono badania rozwoju uszkodzeń w warstwie polichromii poddawanej dużej liczbie bodźców odkształcających, aż do osiągnięcia "równowagowego" układu uszkodzeń odpowiadającej aklimatyzacji obiektu do danej wielkości bodźca niszczącego. Metodyka eksperymentalna polegała na poddawaniu próbek polichromii na drewnie, dużej liczbie cyklicznych odkształceń mechanicznych przy jednoczesnym monitorowaniu rozwoju spękań i odspojen. Odkształcenia mechaniczne imitowały odkształcenia podłoża drewnianego wywołane przez fluktuacje klimatyczne. Monitorowanie uszkodzeń prowadzono przy zastosowaniu interferometrii płamkowej, która odzwierciedla niewielkie, nawet kilkunanometrowe odkształcenie obiektu.

Wyniki przeprowadzonych badań wskazują, że zarówno tempo narastania uszkodzenia, jak i poziom „stabilnego zniszczenia” wywołanego przez dany bodziec zależą od amplitudy powtarzanego cyklicznie bodźca. Przeprowadzone pomiary wskazują, że dla amplitud rozciągających o amplitudach odkształceń względnych równych 0.2 i 0.4 stabilizacja uszkodzenia następuje odpowiednio dla 75 000 oraz 170 000 ilości cykli. Kolejny, rozpoczęty etap badań polega na ocenie wpływu kolejności cykli odkształceń o różnych amplitudach na tempo rozwoju zniszczeń polichromii. Wyznaczenie tej zależności będzie podstawą algorytmu symulującego zniszczenie powierzchni obiektów zabytkowych wywołanych rzeczywistymi bodźcami klimatycznymi występującymi w muzeach gdzie są one przechowywane.

2. Opracowanie technologii wytwarzania stabilnej i łatwo biodegradowalnej piany ciekłej - do zastosowań przemysłowych i biomedycznych

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/01/B/ST8/03717 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

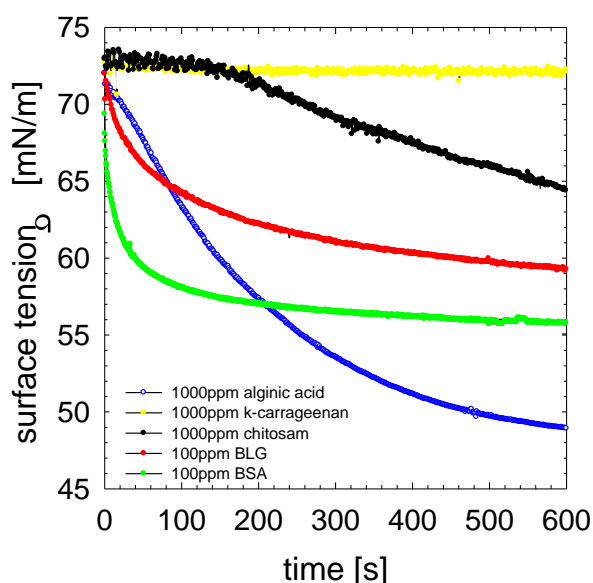
Piany są wykorzystywane w wielu zastosowaniach technologicznych, począwszy od procesów mycia, oczyszczania wód i ścieków, po flotację minerałów, pożarnictwo, produkcję żywności lub wytwarzanie ultra lekkich nanokompozytów. Piany to rozproszone pęcherzyki gazu w roztworze substancji powierzchniowo aktywnej. Głównym procesem zachodzącym w ciekłych pianach jest swobodne wyciekanie filmu. Ciecz spływa przez pianę pod wpływem grawitacji i sił kapilarnych. Proces ten jest ściśle związany z stabilnością piany, przez co ma ogromne znaczenie dla przemysłu.

Projekt ma na celu opracowanie nowej technologii wytwarzania bio-insprowanej, łatwo degradowalnej piany na bazie polisacharydów i/lub białek, stabilizowanej rozproszonymi mikro-, nano- lub koloidalnymi cząstkami. Cząstki jako składniki powinny blokować wyciekanie płynu z warstwy filmu zwiększając stabilność piany, sprężystość oraz granicę plastyczności. Takie biopiany jako łatwo ulegające rozkładowi mogą być alternatywą do obecnie używanych pian na bazie anionowych surfaktantów. Mogą być stosowane jako czynniki stabilizujące w przemyśle, w aplikacjach farmaceutycznych, kosmetycznych, pielęgnacji ciała i biomedycznych, bazując na unikalnych i specyficznych cechach niektórych naturalnych polisacharydów i białek.

Kinetyka zmian napięcia powierzchniowego jest głównym czynnikiem odpowiedzialnym za właściwości pianotwórcze biodegradowalnych polimerów. Szybsze obniżenie napięcia powierzchniowego jest bezpośrednim dowodem szybszej kinetyki adsorpcji, czyli również lepszej stabilizacji piany, zapobiegającej jej koalescencji. Dlatego wykonano serię pomiarów opisujących zmiany dynamicznego napięcia powierzchniowego w roztworach badanych biopolimerów o różnych stężeniach. Jak można się było spodziewać, $\sigma(t)$ malało wraz ze wzrostem stężenia badanego związku. Dla otrzymanych krzywych wykonano szacowania wartości ich początkowego nachylenia względem osi czasu ($d\sigma/dt_{t=0}$), co pozwoliło scharakteryzować tempo obniżania napięcia powierzchniowego dla nowo wytworzonej powierzchni międzyfazowej (tzn. dla sytuacji analogicznej do wytworzenia świeżego filmu pianowego). Wyniki pomiarów pozwoliły na określenie potencjału pianotwórczego badanych związków.

Kolejno, wykonano pomiary pianotwórczości i stabilności pianowej w kolumnie szklanej

dla roztworów badanych biopolimerów. W kolumnie badano automatycznie zmiany wysokości słupów piany i cieczy w czasie, bezpośrednio od momentu rozproszenia powietrza w roztworze aż do chwili zaniku fazy pianowej. Przyjmuj się, że początkowa wysokość frakcji pianowej charakteryzuje zdolności pianotwórcze badanego roztworu, czyli zdolność badanego układu do wytworzenia piany. Natomiast stabilność piany jest opisywana przez tempo zaniku piany. Otrzymane wyniki były w dobrej zgodności z oczekiwanymi na podstawie pomiarów zmian dynamicznego napięcia powierzchniowego.



Rysunek 1. Zmiany dynamicznego napięcia powierzchniowego dla badanych roztworów biosurfaktantów.

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

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

(kierownik projektu: dr inż. Katarzyna Pamin)

Utlennianie fenolu do hydrochinonu i katecholu jest ważną na skalę przemysłową reakcją i ponadto służy jako metoda przetwarzania zanieczyszczeń fenolowych w związki łatwe do usunięcia ze środowiska naturalnego. Kompleksy metali przejściowych takich jak metaloporfiryny, metalofalocyjaniny, metalosaleny i heteropoli związki są znane jako wydajne katalizatory reakcji utleniania i dlatego zostaną użyte jako katalizatory reakcji utleniania fenoli wodą utlenioną.

Prowadzone, w ramach projektu badawczego, prace były poświęcone syntezie anionowych kompleksów porfiryn, ftalocyjanin, salenów i heteropolizwiązków modyfikowanych metalami przejściowymi. W ramach tych prac otrzymane zostały anionowe ligandy porfiryne TPPS i ftalocyjaninowe PcS poprzez polikondensację odpowiedniego monomeru, który następnie został poddany reakcji sulfonowania, a na końcu do otrzymanego ligandu makrocyklicznego został wprowadzony odpowiedni metal przejściowy. Natomiast anionowy ligand salenowy otrzymano przez kondensację zulfonowanego aldehydu salicylowego z etylenodiaminą. Otrzymany ligand SalenS był następnie metalowany solami manganu, kobaltu lub żelaza. Przygotowano również serię soli manganowych, kobaltowych lub żelazowych kwasu fosfowolframowego $M_xH_{3-x}PW_{12}O_{40}$ i fosfomolibdenowego $M_xH_{3-x}PMo_{12}O_{40}$, gdzie $x=1, 2, 3$.

Otrzymane preparaty zostaną scharakteryzowane oraz zastosowane jako katalizatory reakcji utleniania fenoli woda utlenioną prowadzonej w glicerynie i jej pochodnych, które stanowią biodegradowalne środowisko reakcji, uzyskiwane ze źródeł odnawialnych.

4. Monomery tlenków chromu(V), molibdenu (VI) i wolframu (VI) na powierzchni amorficznej krzemionki modyfikowanej glinem. Symulacje periodyczną metodą DFT.

Projekt badawczy "Opus" NCN 2011/03/B/ST4/01223 [2012-2014]

(kierownik projektu: dr Robert Gryboś)

Celem projektu jest porównanie właściwości monomerów metali grupy szóstej (chromu, molibdenu i wolframu) osadzonych na powierzchni amorficznej krzemionki.

Przeprowadzono optymalizację struktury monomerów oraz cząsteczek-sond potrzebnych na dalszych etapach projektu. Wykonano także optymalizację geometrii i pełną analizę wibracyjną powierzchni amorficznej krzemionki. Zoptymalizowano struktury trzech monomerów zakotwiczonych na powierzchni w taki sposób aby domykały 6-cio członowy łańcuch -O-SiO₂-O-.

Energia adsorpcji monomeru MO₃ (M=Cr, Mo, W) z fazy gazowej na powierzchni krzemionki z przekształceniem do MO₂ i uwolnieniem cząsteczki wody zależy od rodzaju metalu. Najniższą energię adsorpcji wykazuje chrom (-2.21 eV), najwyższą wolfram (-3.36 eV). Energia adsorpcji dla molibdenu wynosi -3.08 eV.

Uzyskane wyniki zostaną porównane z adsorpcją monomerów w innych lokacjach na powierzchni amorficznej krzemionki.

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

Projekt badawczy "opus" NCN 2011/03/B/ST4/01216 [2012-2015]
(kierownik projektu: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP)

Przedstawiony grant ma na celu opis właściwości fizykochemicznych i katalitycznych heteropolikwasów (HPA) zmodyfikowanych jonami miedzi (Cu-HPA), przy użyciu połączonych technik eksperymentalnych i obliczeń kwantowo-chemicznych. Celem projektu jest przebadanie układów Cu-HPA, w których jon(y) miedzi zajmują pozycje odpowiednio jonu centralnego, atomu addenda czy kationów kompensujących.

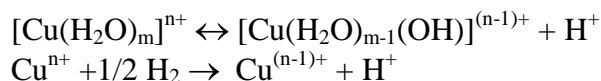
Badania rozpoczęto dla układów heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych o strukturze Keggina $H_3PMe_{12}O_{40}$ (Me=Mo, W). W heteropolikwasie o tej strukturze oktaedry Me-O łączą się ze sobą krawędziami, tworząc cztery trójkowe zespoły, połączone narożami. W środku tetraedru wyznaczonego przez naroża zespołu ośmiościanów znajduje się (w tetraedrycznym otoczeniu tlenowym) atom drugiego pierwiastka kwasotwórczego, najczęściej fosforu.

Eksperymenty rozpoczęto od syntezy soli miedziowych heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych o różnej zawartości kationów kompensujących: $Cu_nH_{3-n}PMe_{12}O_{40}$ (gdzie Me=Mo, W i n=1, 2, 3). W ramach opisu właściwości fizykochemicznych zsyntezowanych układów wykonano pomiary dyfraktometrii rentgenowskiej i analizy termicznej. Dyfraktogramy wskazują na tworzenie się czystych soli HPA (bez udziału kwasów) o strukturze rentgenowskiej zmieniającej się w zależności od ilości wprowadzonej miedzi. Sole wolframowe wykazują większy stopień krystaliczności niż sole miedziowe heteropolikwasu molibdenowego.

Równocześnie z badaniami eksperymentalnymi rozpoczęto obliczenia struktury elektronowej soli miedziowych heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych. Obliczenia prowadzone są przy użyciu zarówno modelu lokalnego - klasterowego (programem Turbomole) jak i nielokalnego - periodycznego (programem VASP), w formalizmie DFT.

Wstępnie przetestowano różne typy funkcjonałów zarówno gradientowych, jak i hybrydowych. Przygotowano do obliczeń: (a) układy z jonem miedzi w pozycji jonu centralnego, o wzorze ogólnym $CuW(Mo)_{12}O_{40}^{n-}$, gdzie n=6, 7, odpowiednio dla Cu^{2+} i Cu^{1+} (b) układy z jonem miedzi w pozycji atomu addenda $PCuW_{11}O_{39}^{5-}$.

Opracowano literaturę dotyczącą soli miedziowych heteropolikwasów molibdenowych i wolframowych. Dane literaturowe podkreślają wysoką kwasowość soli miedziowych HPA. Testowane reakcje z udziałem soli miedziowych to min.: odwodnienie etanolu, utlenianie izobutenu, izomeryzacja ksylenu, dehydratacja 1-butanolu. Znalezione hipotetyczne mechanizmy powstawania centrów kwasowych:



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

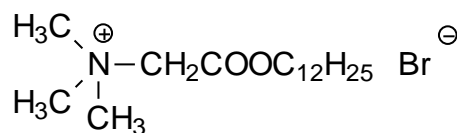
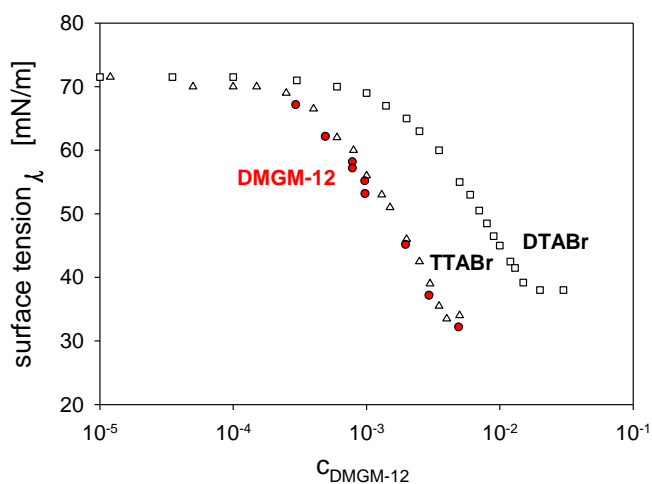
Projekt badawczy "Opus" NCN UMO-2011/03/B/ST4/01217 (2012-2016)

(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

Celem naukowym niniejszego projektu badawczego jest określenie mechanizmu oraz teoretyczny opis tworzenia powierzchniowych kompleksów jon surfaktantu - polielektrolit, w zależności od struktury molekularnej kationowych związków powierzchniowo aktywnych oraz syntetycznych, biokompatybilnych i naturalnych polielektrolitów. Kompleksy takie pozwalają na stabilizację kropli nano- i mikroemulsji, a także stanowią warstwę zakotwiczącą dla adsorpcji filmu polimerowego o pożądanej grubości - powłoki tworzonych nano- i mikrokapsulek.

Dla celów projektu zaproponowano szereg związków powierzchniowo aktywnych typu czwartorzędowych soli amoniowych prostych i typu gemini (pochodne estrowe w kombinacji z podstawnikami n-alkilowymi i alkoksymetylowymi) jak również typu dicephalic. Synteza planowanych struktur opiera się na reakcji czwartorzędowania amin trzeciorzędowych. W tych reakcjach podstawione estry 2-aminoetylowe i N,N-dwupodstawione pochodne α -amino kwasów (glicyny) reagowały z bromkami alkilowymi. Mono pochodną glicyny (DMGM-12) otrzymano w następujących etapach. W pierwszym etapie alkohol dodecyłowy reagował z chlorkiem chloroacetylu w roztworze dichlorometanu dla utworzenia chlorooctanu dodecyłu, który w następnym etapie reagował z dimetylaminą w eterze dietylowym z utworzeniem chlorowodorku estru N,N-dimetyloglicyny. W trzecim etapie neutralizowano chlorowodorki za pomocą nasyconego NaHCO_3 i ekstrahowano eterem dietylowym. W ostatnim etapie wykonano reakcję czwartorzędowania estru dodecyłowego N,N-dimetyloglicyny za pomocą bromku metylu w roztworze eteru w celu utworzenia produktu końcowego bromku N,N,N-trimetylo-aminooctanu dodecyłu- DMGM-12.

Badano właściwości adsorpcyjne roztworów zsyntetyzowanego surfaktantu DMGM-12 na granicy faz. Określono dynamiczne i równowagowe napięcie powierzchniowe na powierzchni swobodnej. Na rysunku 1 przedstawiono izotermę napięcia powierzchniowego DMGM-12 łącznie z izotermą napięcia powierzchniowego dla bromku dodecyłotrójmetyloamoniowego - DTABr i bromku tetradecylotrójmetyloamoniowego - TTABr. Jak widać, izoterma adsorpcji DMGM- praktycznie pokrywa się z izotermą adsorpcji (TTABr), co wskazuje, że wpływ grupy estrowej, w pozycji 2 łańcucha węglowodorowego, na adsorpcję pochodnej, jest podobny do wpływu grupy CH_2 .



Rysunek 1. Izoterma napięcia powierzchniowego DMGM-12 (kółka pełne), wraz z izotermami napięcia powierzchniowego DTABr (kwadraty puste) i TTABr (trójkąty puste).

7. Struktura i funkcja dioksygenaz acireduktonu - badania doświadczalne i obliczeniowe

Projekt badawczy "Opus" NCN NZ1 04999

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

Celem prowadzonych badań jest poznanie struktury oraz mechanizmu reakcji katalitycznej dioksygenaz acireduktonu – metaloenzymów szeroko rozpowszechnionych w przyrodzie i odpowiedzialnych za jeden z etapów recyklingu metioniny. Enzymy te wykazują unikalną zależność specyficzności reakcji katalitycznej oraz struktury od rodzaju metalu związanego w miejscu aktywnym. Realizowane prace obejmują biosyntezę i oczyszczanie badanych enzymów, badania kinetyczne reakcji katalitycznej, krystalizację enzymów oraz modelowanie molekularne. Realizacja tego projektu rozpoczęła się w drugiej połowie 2012 roku i jak dotąd udało się opracować metodę biosyntezy i oczyszczania badanych białek.

PROJEKTY BADAWCZE "PRELUDIUM" (NCN)

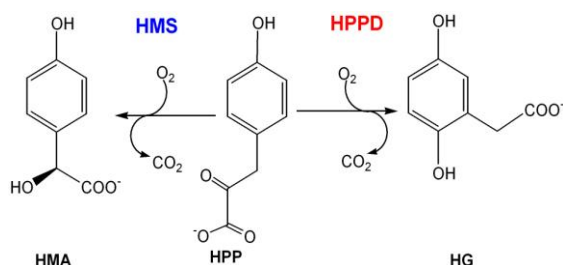
1. Modelowanie aktywności katalitycznej nanostruktur biologicznych na przykładzie wybranych dioksygenaz zależnych od żelaza

Projekt badawczy "Preludium" NCN DEC-2011/01/N/ST4/02330 [2011-2013]
(doktorant: mgr Anna Wójcik, promotor: dr hab. Tomasz Borowski, prof. IKiFP)

Celem projektu jest poznanie mechanizmów reakcji katalitycznych wybranych dioksygenaz zależnych od żelaza oraz określenie czynników determinujących ich specyficzność. Badania wykorzystujące metody chemii teoretycznej poświęcone są dwóm blisko spokrewnionym enzymom hydroksylującym: syntazie hydroksymigdalanu (HMS) i dioksygenazie 4-hydroksyfenylopirogonianu (HPPD). Enzymy te charakteryzują się specyficznością do tego samego substratu i, jak się obecnie przyjmuje, identycznie przebiegającymi pierwszymi etapami reakcji katalitycznych, które w pewnym momencie się rozgałęziają dając produkty hydroksylowane w różnych pozycjach (Rys.1) HMS i HPPD. HMS i HPPD należą do grupy dioksygenaz zależnych od α -ketokwasów, katalizują reakcje, których substratami są tlen cząsteczkowy i 4-hydroksyfenylopirogonian (HPP), a produktami odpowiednio kwas hydroksymigdałowy (HMA) i kwas homogentyzynowy (HG). HPPD zaangażowany jest w metabolizm tyrozyny, a także w biosyntezę plastochinonów i tokoferoli. Inhibitory HPPD wykorzystuje się w leczeniu chorób genetycznych związanych z wadami degradacji tyrozyny, gdyż zapobiegają one gromadzeniu się toksycznych metabolitów. Z kolei HMS uczestniczy w syntezie hydroksy-fenyloglicyny, która jest niezbędną cegiełką do produkcji makrocyclicznych antybiotyków peptydowych, w tym wankomycyny.

W oparciu o dostępne w bazie PDB struktury krystaliczne enzymów HMS i HPPD (PDB: odpowiednio 2R5V i 1CJX) przeprowadzone zostały symulacje dynamiki molekularnej (MD) kompleksów tych enzymów z 4-hydroksyfenylooctanem (HPA) będącym ich ostatnim wspólnym produktem pośrednim. Symulacje te miały na celu wymodelowanie obecnie nieznanymi struktur dla kompleksów enzymy-HPA. Następnie rozpoczęto obliczenia kwantowo-mechaniczne, oparte o teorię funkcjonałów gęstości (Density Functional Theory – DFT) z wykorzystaniem hybrydowego funkcjonału korelacyjno-wymiennego: B3LYP dla modeli HMS i HPPD skonstruowanych na podstawie rezultatów MD.

W wyniku przeprowadzonych badań QM udało się ustalić mechanizm reakcji katalizowanej przez syntazę hydroksymigdalanu (HMS). Szczegółowe badania przeprowadzone dla enzymu HMS pokazały, że znaczną rolę w specyficzności reakcji katalitycznej HMS i HPPD odgrywa Ser201, obecna w obu enzymach. W centrach aktywnych HMS i HPPD, Ser201 tworzy wiązania wodorowe z substratem oraz innymi resztami, które wpływają na jej orientację. Różne orientacje Ser201 w centrach katalitycznych HMS i HPPD mają znaczny wpływ na orientację substratu, a co za tym idzie na specyficzność reakcji. Obecnie prowadzone są badania dla drugiego z enzymów - HPPD.



Rysunek 1. Reakcje katalizowane przez HMS i HPPD

2. Wpływ stopnia utlenienia metali nieszlachetnych w układach Au-Me-O/TiO₂ na oddziaływanie między nanocząstkami złota a nośnikiem.

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2011/03/N/ST5/04313 [2012-2013]

(doktorant: mgr inż. Jan Mizera, promotor: dr hab. Ryszard Grabowski prof IKiFP)

Od czasu odkrycia aktywności katalitycznej nanocząstek złota w wielu reakcjach, takich jak utlenianie, uwodornienie i odwodornienie, katalizatory te udało się zastosować komercyjnie tylko w nielicznych przypadkach. Główny problem, jaki dotyka w/w układy katalityczne to ich względnie niska stabilność w czasie pracy, spowodowana spadkiem stopnia utlenienia złota, akumulacji węglanów i mrówczanów na centrach aktywnych powierzchni złota. Droga prowadząca do uzyskania stabilnego katalizatora prowadziłaby przez zmianę oddziaływania między nanocząstką złota a nośnikiem, tak by katalizator stał się odporny na opisane powyżej zjawiska. Koncepcją projektu jest zatem zmodyfikowanie aktywnego katalizatora (Au/TiO₂) tlenkami metali mających różne zdolności mieszania się ze złotem i z TiO₂ (Fe, Ni, Cu, Ag) tak aby wyznaczyć ich wpływ na nanocząstki złota oraz poszerzyć perspektywę postrzegania zjawisk zachodzących na powierzchni tych katalizatorów.

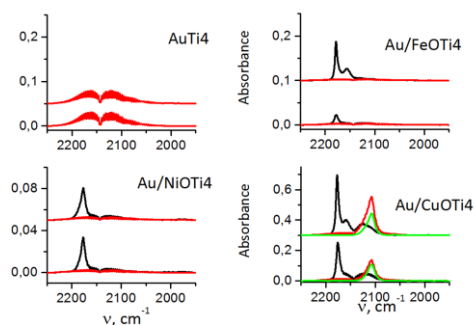
Wykonane dotychczas badania na temat katalizatorów Au-Me-O/TiO₂ uzupełniono o badanie FTIR katalizatora odniesienia Au/TiO₂, badanie aktywności otrzymanych katalizatorów w reakcji utleniania propanu oraz przeprowadzenie badań TPD – DTA i XRD preparatów CuO/TiO₂ i FeO_x/TiO₂ w celu stwierdzenia możliwości tworzenia tytanianów poszczególnych metali domieszkowych.

Wyniki FTIR (**Rysunek 1**) pokazały, że na katalizatorze odniesienia Au/TiO₂ cząsteczka CO nie adsorbuje się, z czego wynika, że piki obserwowane dla katalizatorów domieszkowanych są skutkiem obecności dodatkowych jonów, które najprawdopodobniej powodują zdefektowanie struktury TiO₂. Choć największy pik przy 2175 cm⁻¹ odpowiada centrom β na Ti⁺⁴, to wyniki pokazują, że adsorpcja na tych centrach może zachodzić jedynie wtedy, gdy katalizator jest domieszkowany innym metalem nieszlachetnym.

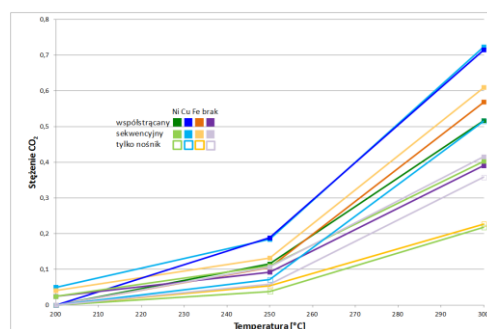
Badania TPD-DTA i XRD preparatów CuO/TiO₂ i FeO_x/TiO₂ nie pozwoliły na rozstrzygnięcie kwestii powstawania tytanianów w katalizatorach domieszkowanych. Preparaty prażone 400°C nie wykazały obecności tlenków mieszanych w XRD, natomiast badania DTA sugerują jedynie możliwość zaistnienia egzotermicznej reakcji w cieple stałym w temperaturach 400-550°C.

Wyniki katalityczne (**Rysunek 2**) utleniania propanu pokazały, że najaktywniejsze są katalizatory domieszkowane Cu, nieco mniej aktywne są katalizatory domieszkowane Fe, natomiast aktywność katalizatora domieszkowanego Ni jest, w zależności od metody preparatyki, wyższa bądź porównywalna z katalizatorem odniesienia. Zestawienie aktywności katalizatorów (Au/MeO+TiO₂) z aktywnością ich nośników (MeO+TiO₂) pokazało, że nanocząstkom Au można przypisać wysoką aktywność w katalizatorach promowanych żelazem. Aktywność pozostałych preparatów wynika ze znacznej aktywności samych nośników.

Wskazówki, jakie dostarczyły badania, umożliwią dokładniejsze określenie wpływu metali domieszkowych na aktywność możliwości katalitycznej układu Au/TiO₂.



Rysunek 1. Wyniki eksperymentów FTIR



Rysunek 1. Wyniki katalityczne utleniania

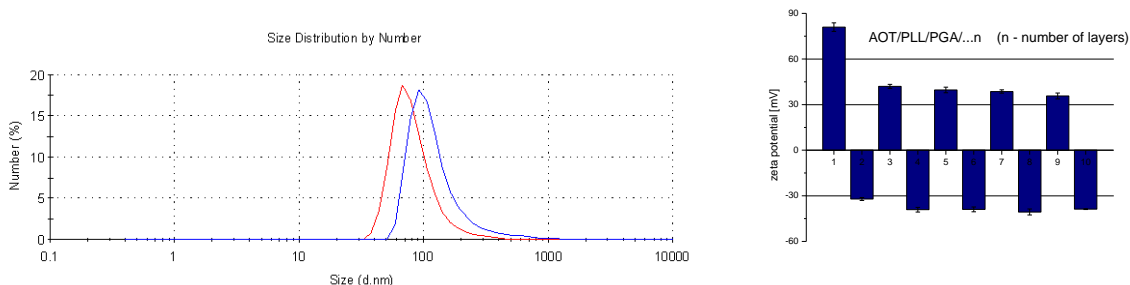
3. Synteza biozgodnych nanoosników dla wybranych substancji neuroprotecyjnych

Projekt badawczy "Preludium" NCN 2011/03/N/ST5/04808

(doktorant: mgr inż. M. Piotrowski, promotor: prof. Piotr Warszyński)

Celem naukowym projektu jest opracowanie metody syntezy biokompatybilnych nanoosników leków neuroprotecyjnych oraz zbadanie działania enkapsulowanych leków na modelowe komórki.

Nanoosniki wytworzono za pomocą techniki layer-by-layer (LbL), poprzez adsorpcję polielektrolitów (np. PLL - bromowodorek poli(L-lizyny), PGA - sól sodowa poli(kwasu L-glutaminowego)) na rdzeniach emulsyjnych (np. IPM - mirystynian izopropylu). Nanoemulsje stabilizowane były poprzez kompleksy polielektrolitów oraz surfaktantów (np. AOT - dokuzynian sodu). Optymalizacja metody syntezy nanoosników pod względem rozmiarów oraz innych właściwości fizykochemicznych, takich jak ładunek elektryczny kolejnych warstw adsorbowanych na emulsyjnym rdzeniu, opiera się odpowiednio na pomiarach średnicy hydrodynamicznej (technika DLS - Dynamic Light Scattering) oraz pomiarach potencjału zeta (technika LDE - Laser Doppler Electrophoresis). Rysunek 1 prezentuje rozkład wielkości nanokapsulek IPM/AOT/(PLL/PGA)_n. Ich średni rozmiar wynosi ~80nm dla n=1 i wzrasta wraz ze wzrostem liczby zaadsorbowanych warstw do ~100nm dla n=10 (Rys. 1a). Zaobserwowane zmiany potencjału zeta potwierdzają tworzenie się kolejnych warstw polielektrolitowych (Rys. 1b). Wartości potencjału zeta poniżej ~-30mV dla warstw polianionowych oraz powyżej ~30mV dla warstw polikationowych wskazują na odpowiednio wysoki ładunek powierzchniowy umożliwiającą elektrostatyczną stabilizację suspensji nanokapsulek.



Rysunek 1. a) Rozkład wielkości nanokapsulek IPM/AOT/(PLL/PGA/...n) (n=1, n=10); b) Potencjał zeta nanokapsulek IPM/AOT/(PLL/PGA/...n) (n=1,...,10) dla kolejnych zaadsorbowanych warstw polielektrolitowych.

Nanoosniki będą dalej modyfikowane powierzchniowo w celu uzyskania maksymalnej biozgodności (np. poprzez zastosowanie kopolimerów biozgodny polielektrolit-glikol polietylenowy). Dodatkowo nanopreparaty będą wizualizowane przy użyciu technik mikroskopii elektronowej (SEM - Scanning Electron Microscopy). Wewnątrz rdzenia nanokapsulek zamknięte zostaną wybrane inhibitory wewnątrzkomórkowych kaskad reakcji biochemicznych prowadzących do śmierci komórek nerwowych (np. inhibitory kaspaz czy kalpain). Badania dotyczące efektywności nanoosników substancji aktywnych, poprzedzone testami cytotoksyczności pustych nanopreparatów, będą prowadzone na modelowych hodowlach komórkowych neuroblastomy - SH-SY5Y, a stopień uszkodzeń i neuroprotekcji będzie oceniany przy pomocy testów biochemicznych i morfologicznych (MTT, LDH, itp.). Wyniki zostaną poddane analizie wariancji (ANOVA) w celu wykazania istotności statystycznej przeprowadzonych doświadczeń.

PROJEKTY BADAWCZE "IUVENTUS PLUS (MNiSW)

1. Wybrane aspekty oddziaływań pomiędzy kwasami α -L-guluronowym, β -D-mannuronowym a dwuwartościowymi jonami metali

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP IP2011 042471 [2012-2013]

(kierownik projektu: dr Wojciech Płaziński)

Celem było zbadanie strukturalnych i energetycznych aspektów oddziaływań pomiędzy jonami wapnia a kwasami α -L-guluronowym, β -D-mannuronowym (w formie anionów). Badania obejmowały m.in. poznanie struktury kompleksów jon-kwas i natury ich wzajemnych oddziaływań oraz wyznaczenie profili energii swobodnej pozwalających oszacować ich stabilność.

Badania zostaną przeprowadzone głównie metodą dynamiki molekularnej (MD) wg. protokołu QM/MM (*quantum mechanics/molecular mechanics*), co oznacza, że część układu (np. cząsteczka kwasu guluronowego oraz badany jon) modelowane są z dokładnością mechaniki kwantowej; pozostała część - klasycznej mechaniki molekularnej. W praktyce umożliwia to zwiększenie dokładności obliczeń przy większym odzwierciedleniu stanu rzeczywistego (badane związki znajdują się w środowisku wodnym). Do chwili obecnej wykonano następujące zadania: (i) Przeprowadzenie symulacji QM/MD dla układu α -L-guluronian/jon wapnia oraz β -D-mannuronian-jon wapnia (czas rzędu 20 ps). (ii) Zaprojektowanie i przeprowadzenie protokołu *Umbrella Sampling* w celu oszacowania profilu energii swobodnej towarzyszącemu procesowi wiązania/dysocjacji dla par jon wapnia/ α -L-guluronian oraz jon wapnia poli(α -L-guluronian) wg. tzw. modelu *egg-box*.

Wyniki pozwoliły na: (i) ustalenie preferowanego sposobu wiązania jonu (dwucentrowe, jon koordynowany jest przez oba atomy tlenu grupy karboksylowej); (ii) weryfikację (pozytywną) uzyskanego uprzednio przy pomocy klasycznych pól siłowych modelu strukturalnego opisującego budowę kompleksu typu: 'dwa łańcuchy poli(α -L-guluronianu)/jony wapnia'.

W perspektywie odnotowanych trudności w eksperymentalnym zbadaniu (a także interpretacji danych) podstawowych właściwości kompleksów jon metalu-kwas uronowy, wyniki są nie tylko uzupełnieniem lub opisem już istniejących danych, ale także istotnym wkładem w poznanie nowych cech badanych układów.

2. Nowa metoda syntezy zoli srebra i mechanizm oddziaływania nanocząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy zjawisk elektrokinetycznych oraz metod: AFM, mikroskopii fluorescencyjnej i QCM-D

Projekt badawczy "Iuventus Plus" MNiSW IP2011 0353 71 [2012-2014]

(kierownik projektu: dr Aneta Michna)

Mechanizmy rządzące oddziaływaniem cząstek koloidalnych z powierzchniami międzyfazowymi determinujące procesy osadzania i adhezji mają ogromne znaczenie w procesach naturalnych i w praktyce. Jednakże, zarówno mechanizm jak i kinetyka osadzania takich cząstek na granicy faz ciało stałe/ ciecz nie zostały dotychczas określone w dostatecznym stopniu.

Głównym celem realizowanego projektu było opracowanie efektywnej metody syntezy monodispersyjnych zoli srebra, bez użycia toksycznych reduktorów i substancji stabilizujących, ich oczyszczenie poprzez filtrację membranową oraz zrozumienie i rozwinięcie istotnych aspektów mechanizmów osadzania nanocząstek (srebra i lateksów fluorescencyjnych) na granicy faz ciało stałe/ roztwór koloidalny, oraz opracowanie efektywnej metody detekcji nanocząstek na powierzchniach granicznych (mika pokryta różną ilością polielektrolitu).

W roku 2012 skupiono się na syntezie nanocząstek srebra przy użyciu cukrów redukujących (glukoza) i ich oczyszczaniu z wykorzystaniem filtracji membranowej. Charakterystyka zolu w objętości obejmowała wykonanie ich widm adsorpcyjnych, pomiary współczynników dyfuzji (średnic hydrodynamicznych) techniką dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz ruchliwości elektroforetycznej metodą laserowego pomiaru prędkości na podstawie zjawiska Doppler'a (LDV) w funkcji siły jonowej (I) i pH. Ponadto, technikę DLS i LDV użyto do charakterystyki objętościowej komercyjnych lateksów fluorescencyjnych oraz chlorku poli(dwuallilodwumetyloamoniowego) (PDADMAC) tj. mocnego polielektrolitu o ciężarze cząsteczkowym 160 kDa.

Przy zastosowaniu zmodyfikowanej procedury Tollensa uzyskano stabilne zole srebra z maksimum absorpcji przy $\lambda=434$ nm. Wyznaczona średnica hydrodynamiczna nanocząstek srebra wynosiła 70 nm, a ich ruchliwość elektroforetyczna $-3.3 \mu\text{m cm/Vs}$ niezależnie od siły jonowej i pH ośrodka w zakresie (I= 10^{-5} - 10^{-2} M) i pH (3-9).

Pomiary ruchliwości elektroforetycznej PDADMAC-u w funkcji siły jonowej wykazały jej spadek od $6.5 \mu\text{m cm/Vs}$ w 10^{-3} M do $2 \mu\text{m cm/Vs}$ w 0.15 M. Również współczynnik dyfuzji polielektrolitu malał wraz ze wzrostem siły jonowej i był równy $2.58 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ (dla 10^{-3} M) i $1.31 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ (dla 0.15 M). Obserwowana zależność sugeruje, iż w niskich siłach jonowych PDADMAC ma kształt silnie wydłużonego pręta, natomiast w wysokich siłach jonowych przybiera kształt torusa.

Stwierdzono również, iż potencjał zeta lateksów fluorescencyjnych maleje wraz z siłą jonową ośrodka (pH=5.5) i wynosi +45 mV dla 10^{-4} M, +40 mV dla 10^{-3} M, +34,5 mV dla 10^{-2} M i +13,6 mV dla 0.15M. Natomiast średnia średnica hydrodynamiczna cząstek lateksowych osiągała praktycznie stałą wartość równą 250 nm, niezależnie od siły jonowej ośrodka w zakresie sił jonowych (10^{-4} - 10^{-2} M), pH (5.8)

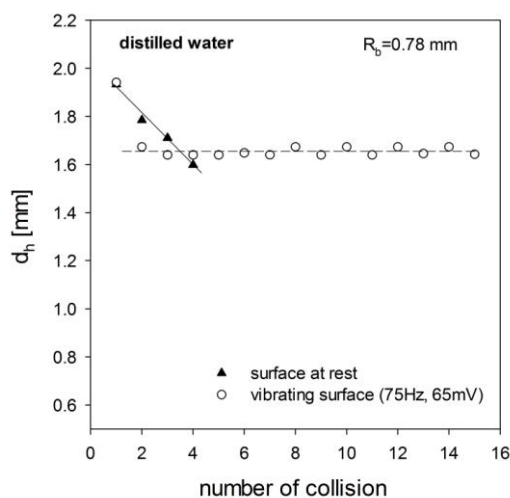
Przeprowadzone badania umożliwiły opracowanie syntezy nanocząstek srebra bez użycia toksycznych reduktorów i dodatku substancji stabilizujących, a dzięki charakterystyce objętościowej cząstek i polielektrolitów ustalono optymalne warunki dla zbadania mechanizmu osadzania nanocząstek na powierzchniach heterogenicznych.

PROJEKTY "MOBILNOŚĆ PLUS" (MNiSW)

1. Czynniki determinujące stabilność ciekłych filmów powstających w warunkach dynamicznych na powierzchniach ciecz-gaz i ciecz-ciało stałe

Projekt "Mobilność Plus" MNiSW [2011-2012]
(kierownik projektu: dr Jan Zawala)

Projekt ma na celu uzyskanie nowych danych, które pogłębią wiedzę o zjawiskach związanych z powstawaniem i stabilnością ciekłych filmów tworzących na różnych powierzchniach między-fazowych w warunkach dynamicznych. W okresie sprawozdawczym obserwowano zderzenia pęcherzyka o średnicy 0.78 mm z powierzchnią woda/powietrze za pomocą szybkiej kamery. Dzięki zastosowaniu opracowanego na Uniwersytecie w Liege zestawu eksperymentalnego, powierzchnia międzyfazowa mogła być (i) w spoczynku oraz (ii) wibrować z kontrolowaną częstotliwością i amplitudą. Podczas eksperymentów wykazano, iż w czystej wodzie badany pęcherzyk odbijał się od powierzchni będącej w spoczynku 4 krotnie, zanim następowało jego pęknięcie, co odpowiadało czasowi koalescencji (t_c), zdefiniowanemu jako czas liczony od momentu pierwszego uderzenia do momentu pęknięcia pęcherzyka, równemu 0.075 s. Na powierzchni, na której indukowane były zaburzenia, czas ten ulegał spektakularnemu wydłużeniu. Pęcherzyk mógł odbijać się od powierzchni kilkaset razy, co powodowało, iż nawet w czystej wodzie destylowanej, t_c wzrastał o kilka rzędów wielkości ($t_c > 10$ s). Analiza zarejestrowanych obrazów pozwoliła wykazać, że wzrost wartości t_c skorelowany był z praktycznie stałą i niezmienną maksymalną deformacją pęcherzyka pod powierzchnią wibrującą. Rys. 1 przedstawia porównanie maksymalnej horyzontalnej średnicy pęcherzyka (d_h) podczas kolejnych zderzeń z powierzchnią woda/powietrze spoczywającą i wibrującą. Jak widać, w przypadku powierzchni spoczywającej wartość d_h malała i osiągała minimum podczas ostatniego zderzenia. W przypadku powierzchni wibrującej wartość ta pozostawała praktycznie stała. Wyniki badań pokazały, że podczas zderzenia pęcherzyka z powierzchnią woda/powietrze do koalescencji może dojść tylko wtedy, kiedy promień powstałego filmu jest na tyle mały, aby ciecz z filmu, czyli warstwy cieczy oddzielającej pęcherzyk od powierzchni międzyfazowej, miała szansę wyciec do krytycznej grubości pęknięcia podczas trwania zderzenia. W przeciwnym wypadku obserwowane jest odbicie pęcherzyka od powierzchni. Uzyskane wyniki stanowią dodatkowy dowód na to, iż promień (rozmiar) ciekłego filmu odgrywa kluczową rolę w jego stabilności w warunkach dynamicznych.



Rysunek 1. Deformacja pęcherzyka w funkcji numeru zderzenia z powierzchnią woda/powietrze znajdującą się w spoczynku oraz wibrującą z określoną częstotliwością.

PROJEKTY "HOMING PLUS" (FNP)

1. Struktura i właściwości elektryczne filmów kompozytowych zawierających nanocząstki przewodzące

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

(kierownik projektu: dr Marta Kolasińska-Sojka)

Celem naukowym projektu było określenie mechanizmu tworzenia wielowarstwowych filmów nanokompozytowych oraz zbadanie wpływu struktury i właściwości powierzchniowych nanokompozytów na ich funkcjonalność i zastosowanie w dziedzinie nowoczesnych czujników chemicznych.

Nanokompozyty otrzymywano techniką sekwencyjnej adsorpcji przeciwieście naładowanych polielektrolitów i/lub nanocząstek błękitu pruskiego z roztworów. Badane nanocząstki wytypowano ze względu na ich charakter elektroaktywny, a ponadto błękit pruski ma zdolność katalizowania rozkładu perhydrołu, przez co może być wykorzystany jako czynnik aktywny w czujnikach pomiarowych określających zawartość nadtlenku wodoru w danym środowisku. Prowadzone prace obejmowały badania adsorpcji wielowarstw za pomocą mikrowagi kwarcowej, topografii powierzchni wybranych nanokompozytów techniką AFM, badania ich struktury za pomocą elipsometrii spektroskopowej oraz charakterystykę elektrochemiczną przy użyciu woltamperometrii cyklicznej. Badania elektrochemiczne wykorzystywały odwracalną reakcję redoks błękitu pruskiego (redukuje się on do bieli pruskiej).

Na podstawie prowadzonych badań stwierdzono, że struktura i właściwości elektrochemiczne filmów nanokompozytowych, zawierających błękit pruski zależą od warunków osadzania pierwszej, zakotwiczonej warstwy polielektrolitowej. W warunkach, gdy jest ona adsorbowana z roztworu o pH zapewniającym jej całkowitą dysocjację, nie obserwuje się agregacji osadzonych nanocząstek, co z kolei wpływa na wielkość odpowiedzi prądowej w czasie pomiarów elektrochemicznych. Ponadto zaobserwowano liniową zależność wielkości prądów utleniania i redukcji od ilości warstw nanocząstek błękitu pruskiego obecnego w wielowarstwowym filmie. Zbadano również zależność odpowiedzi prądowej badanych serii multiwarstw od siły jonowej, z jakiej osadzano warstwy polikationowe. Zaobserwowano, iż w badanym zakresie (od 0.015 M NaCl do 1.5 M NaCl) zarówno ilość nanocząstek błękitu, jak i wielkość prądów utleniania i redukcji rośnie ze wzrostem siły jonowej dla użytego polikationu. Porównywano również wpływ rodzaju polikationu (PAH, PDADMAC, PAA) na zaadsorbowaną ilość błękitu pruskiego oraz odpowiedź prądową otrzymanego filmu nanokompozytowego, jednak różnice w badanych parametrach, wynikające z użycia wymienionych polikationów są mniejsze niż rozrzut eksperymentalny dla dowolnego z polikationów.

Mając na uwadze zastosowanie zaprojektowanych filmów nanokompozytowych w dziedzinie czujników wykrywających nadtlenek wodoru, badania elektrochemiczne prowadzono dodatkowo w obecności nadtlenku wodoru w celu wyskalowania potencjalnych czujników. Polegały one na rejestrowaniu woltamperogramów w roztworze KCl z dodatkiem znanej ilości H_2O_2 . Eksperymenty prowadzone były w takim zakresie potencjału, żeby zarejestrować reakcję redukcji H_2O_2 do OH^- , która, w obecności błękitu pruskiego, zachodzi przy potencjale ok. -1V (przy użyciu elektrody chlorosrebrowej, jako elektrody odniesienia). Reakcja ta jest najbardziej miarodajną w stosowanym układzie do detekcji H_2O_2 . W badanym zakresie stężeń H_2O_2 obserwowano liniowy spadek prądu wraz ze wzrostem stężenia H_2O_2 w zakresie od 0.5mM do 50mM H_2O_2 . Oznacza to, że badane filmy mogą być wykorzystywane nie tylko do detekcji obecności nadtlenku wodoru, ale również do określenia jego ilości w danym środowisku, wg wykonanej krzywej kalibracyjnej.

PROJEKTY "POMOST" (FNP)

1. Selektywna hydrogenoliza gliceryny do glikoli via acetol na katalizatorach heterogenicznych zawierających metale i tlenki metali.

Projekt "Pomost" FNP POMOST/2011-3/7 [2011-2014]

(kierownik projektu: dr inż. Katarzyna Samson)

W roku 2012 realizowano poszczególne zadania badawcze zgodnie z zaplanowanym harmonogramem projektu.

1) Rozpoczęto (i zakończono) syntezę nośników chromitowych metali dwuwartościowych, posiadających strukturę normalnego spinelu, o wzorze ogólnym $Me_{II}Cr_2O_4$, gdzie $Me = Cu, Co, Zn, Ni, Mg, Fe$ i Mn . Chromity syntetyzowano metodą cytrynianową zapewniającą wysoki stopień dyspersji fazy aktywnej, homogeniczność i dobrą powtarzalność. Otrzymane prekursory cytrynianowe suszono w temperaturze $130^\circ C$ przez 8 godzin i wstępnie prażono w $400^\circ C$, przez 5 godzin, w przepływie powietrza. Zsyntetyzowano dodatkowo chromit miedziowy $CuCr_2O_4$ metodą Adkinsa, z dwuchromianu amonu. Uzyskanie oczekiwanej struktury spinelu normalnego następuje w wyniku właściwego prażenia chromitu, przy czym warunki obróbki termicznej są różne dla każdego wprowadzanego metalu dwuwartościowego (zakres temperatur prażenia: $600-900^\circ C$, czas prażenia 5-20 godzin, w przepływie gazu utleniającego lub redukującego). Dla wszystkich otrzymanych nośników chromitowych wykonano badania XRD (potwierdzony skład fazowy: 73-100% spinelu), pomiary powierzchni właściwej ($4-60 m^2/g$) i porowatości oraz redukowalności metodą H_2TPR (profile redukcji zależne od rodzaju metalu). Otrzymane spinele będą w dalszym etapie prac nośnikami aktywnej fazy miedziowej dla katalizatorów do reakcji hydrogenolizy glicerolu.

2) Kolejnym etapem była preparatyka katalizatorów do reakcji hydrogenolizy glicerolu, zawierających aktywną fazę miedziową naniesioną na spreparowane spinele chromitowe. Na podstawie przeglądu literaturowego zdecydowano o wprowadzeniu na każdy chromit kilku stężeń fazy miedziowej (5, 10, 15, 20 i 30% wag. CuO), metodą impregnacji nośnika chromitowego wodnym roztworem azotanu miedzi. Otrzymane katalizatory (45 próbek) suszono w $120^\circ C$, 10 godzin a następnie prażono w $350^\circ C$, 5 godzin w przepływie powietrza.

3) Rozpoczęto również kolejne zadanie badawcze, jakim jest charakterystyka fizykochemicznych otrzymanych układów katalitycznych. Zdecydowano o wykonaniu pomiarów powierzchni właściwej i porowatości dla wszystkich katalizatorów (w obrębie trzech zbadanych serii na spinelach Cu, Co i Zn zarówno powierzchnia właściwa, jak i porowatość zmniejsza się nieznacznie wraz ze wzrostem ilości CuO); dla wybranych systemów katalitycznych (Cu /chromit miedziowy otrzymany metodą cytrynianową i Cu /chromit miedziowy otrzymany metodą Adkinsa) zdecydowano o wykonaniu pomiarów XRD i H_2TPR .

4) Rozpoczęto prace związane z zaprojektowaniem i zestawieniem układu do przeprowadzenia testów katalitycznych w reakcji hydrogenolizy glicerolu. Zakupiono dwie kapilarne kolumny chromatograficzne (do chromatografów GC HP i Perkin-Elmer) do rozdzielania wszystkich potencjalnych ciekłych reagentów hydrogenolizy glicerolu. Przeprowadzono na nich kalibrację jakościową (dla każdego reagenta reakcji hydrogenolizy glicerolu) a następnie kalibrację ilościową mieszaniny wszystkich potencjalnych reagentów reakcji: metanolu, etanolu, 1- i 2-propanoli, acetolu, glikolu etylenowego, 1,2 i 1,3-propandiole (detektor FID, programowana temperatura pracy kolumny). Analizę zdecydowano się prowadzić na kolumnie DB-PS624 w GC HP, na którym uzyskano znacznie lepszy rozdział substratów i produktów reakcji hydrogenolizy glicerolu. Ponadto wybrano do testów katalitycznych reakcji hydrogenolizy (warunki reakcji w nawiasach) reaktor ciśnieniowy typu "batch" o pojemności 100 ml posiadający regulację ciśnienia (14 atm.), temperatury ($200^\circ C$) i mieszania, będący na wyposażeniu IKiFP PAN.

5) Przeprowadzono (z wynikiem pozytywnym) rekrutację stypendysty, realizującego pracę magisterską będącą częścią projektu Pomost, zgodnie z procedurami wymaganymi przez FNP.

STRATEGICZNE PROJEKTY BADAWCZE (NCBiR)

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

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

(kierownik projektu: dr hab. Alicja Drelinkiewicz prof IKiFP)

Badania w tym projekcie zostały rozpoczęte w październiku 2012. Badania te dotyczą określenia czynników wpływających na aktywność nośnikowych katalizatorów metalicznych (Pd, Pt, Pd-Pt) w reakcji konwersji wodoru z tlenem powietrza prowadzącej do wytworzenia wody. W celu usuwania wodoru z obudowy reaktora nuklearnego stosowane są pasywne katalityczne rekombinatory (passive autocatalytic recombiners). Są to urządzenia zawierające katalizator aktywny w reakcji konwersji wodoru z tlenem powietrza prowadzącej do wytworzenia wody. Rozmieszczone one są we wstępnie określonych miejscach obudowy reaktora, w których wzrost stężenia wodoru jest najbardziej prawdopodobny. Zwykle, w obudowie reaktora znajduje się 40-47 pasywnych autokatalitycznych rekombinatorów (PAR).

Pasywne katalityczne rekombinatory zbudowane są z szeregu stalowych płyt umocowanych równolegle. Płyty te zawierają katalizator, platynę lub pallad, które osadzone są metodą "wash-coat" na podłożu z tlenku glinu. Słowo "pasywny" wskazuje, że reaktory te są zdolne do usuwania wodoru bez użycia dodatkowych źródeł energii jak i bez konieczności obsługi operatora. PAR powinien wykazywać aktywność w reakcji konwersji wodoru do wody w warunkach temperatury pokojowej. Reaktory PAR pracują w warunkach konwekcyjnego przepływu gazu. Szczególnie istotna jest odporność katalizatorów na wodę, ze względu na wysoki poziom wilgoci panujący w obudowie reaktora.

Reakcja spalania wodoru do wody $H_2 + 0.5O_2 = H_2O$ zachodząca w reaktorach PAR, a katalizowana przez obecne tam metale szlachetne (platynę, pallad) jest procesem egzotermicznym, gdyż wytworzeniu jednej cząsteczki wody towarzyszy wydzielenie 240 kJ. Ponadto, reakcja spalania wodoru przebiega w mieszaninie wodoru z powietrzem jako proces homogeniczny bez udziału katalizatora, wówczas, gdy temperatura mieszaniny gazowej jest ok. $550^{\circ}C$. Jest to niekontrolowane spalanie wodoru prowadzące do wybuchu. Zachodzie tego procesu, jest problemem, który ujawnił się w toku pracy reaktorów PAR.

W obecnym projekcie podjęte zostały badania, których celem jest teoretyczna i eksperymentalna weryfikacja czynników warunkujących aktywność katalizatorów uzyskanych poprzez osadzenie cząstek metali szlachetnych (platyny, palladu) na podłożach tlenkowych i metalicznych (blachy niklowe) w reakcji konwersji wodoru do wody z udziałem tlenu powietrza. Przeprowadzona została synteza szeregu katalizatorów palladowych o zmiennej zawartości Pd (0.5-4 wt %) na nośnikach Al_2O_3 i SiO_2 metoda impregnacji oraz metodą "water-in-oil" mikroemulsji odwróconej. Metoda ta umożliwia uzyskanie katalizatorów o z góry zadanej wielkości nanocząstek metalu, jak i kontrolowanym stężeniu powierzchniowym metalu. Badana reakcja wodoru z tlenem jest zasadniczo wybuchem, co skutkuje jej bardzo dużą (niemierzalną) szybkością w warunkach laboratoryjnego reaktora przepływowego. Przeprowadzono szereg wstępnych testów katalitycznych stosując bardzo niskie stężenia wodoru w powietrzu (0.5-3 % vol.) oraz zmienne szybkości przepływu celem ustalenia warunków umożliwiających porównanie aktywności badanych katalizatorów.



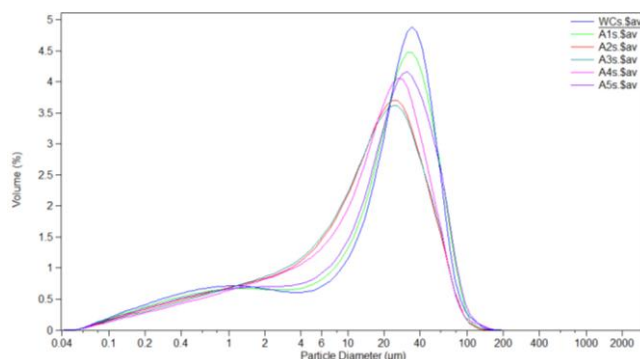
2. Badanie wpływu środków powierzchniowo-czynnych na proces wstępnej hydrolizy celulozy

Strategiczny projekt badawczy NCBiR SP//E/4/65786/10 [2011-2012]

Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk, dr inż. Małgorzata Nattich-Rak)

Celem prac przeprowadzonych w ramach niniejszego projektu badawczego było określenie wpływu dodatku soli nieorganicznych na efektywność procesu hydrolizy celulozy oraz dodatku surfaktantów na stopień dyspersji mikrokryształitów celulozy, co umożliwi wytypowanie optymalnego surfaktantu oraz jego stężenia stymulującego dyspersję celulozy. W przypadku hydrolizy mikrokryształicznej celulozy ocena degradacji była możliwa dzięki porównaniu próbek modyfikowanych z próbką wzorcową. Na Rys. 1 przedstawiono przykładowe rozkłady wielkości cząstek mikrokryształicznej celulozy modyfikowanej 2% roztworem dwuwodorofosforanu sodu (NaH_2PO_4) w różnych temperaturach. Największe zmiany w serii A względem próbki wzorcowej obserwuje się dla degradacji prowadzonej w temperaturze 180°C w czasie 2 h. Bardzo zbliżone rezultaty uzyskuje się dla procesu prowadzonego w temperaturze 160°C , który z punktu widzenia nakładu energii jest bardziej ekonomiczny. Obserwowano również, że dwukrotne wydłużenie czasu oddziaływania NaH_2PO_4 (próbki A1 i A5) powoduje niewielki wzrost stopnia dyspersji mikrokryształitów.



Rysunek 1. Rozkład wielkości mikrokryształitów dla suspensji celulozy poddawanej obróbce termicznej uzyskane przy pomocy dyfraktometru Beckman Coulter (seria A): dla WC5 (próbka wzorcowca), $T = 100^\circ\text{C}$, dla A, $T = 120-200^\circ\text{C}$.

Prowadzono również badania wpływu surfaktantów, m.in. CTAB i SDS, Wellaxon oraz PEG na stopień dyspersji celulozy. Przeprowadzeni obszernych pomiarów przy zastosowaniu dyfraktometru laserowego oraz przy pomocy metody SEM stwierdzono, że najlepszy efekt jest osiągany dla próbek o składzie: 2% H_3PO_4 + 0.005% CTAB + 10g celulozy mikrokryształicznej (średnia wielkość mikrokryształitów $20\ \mu\text{m}$) oraz 2% H_3PO_4 + 0.005% SDS + 10g celulozy mikrokryształicznej (średnia wielkość mikrokryształitów $21\ \mu\text{m}$). Porównując je z próbką wyjściową osiągnięto spadek wielkości cząstki o ok. 30%. Biorąc pod uwagę nowatorski charakter przeprowadzonych badań związanych z określeniem wpływu surfaktantu na przekształcenie celulozy z masy lignocelulozowej otrzymane wyniki można uznać za obiecujące.

PROJEKTY BADAWCZE "LIDER" (NCBiR)

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

Projekt badawczy "Lider" NCBiR LIDER/33/147/L-3/11/NCBR/2012 [2012-2015]
(kierownik projektu: dr Maciej Szaleniec)

Projekt został rozpoczęty w listopadzie 2012. Celem projektu jest opracowanie metody enzymatycznej, regioselektywnego hydroksylowania pochodnych cholesterolu w pozycji C25, z wykorzystaniem nowego enzymu molibdenowego.

W ramach realizacji projektu zatrudniono pierwszych dwóch członków zespołu oraz przeprowadzono ich szkolenie (min. z zakresu transferu technologii i zarządzania projektami na szkoleniu NCBiR i Brookera Innowacji Zespołu ds. współpracy naukowej z biznesem UE oraz z zakresu biologii molekularnej).

W ramach realizacji zadania 1 "Hodowla bakterii *S. denitrificans*" przeprowadzono zleconą hodowlę bakterii w skali 16 i 100 l w fermenterach Katedry Biotechnologii i Mikrobiologii Żywności (grupa prof. Włodzimierza Grajka) na Uniwersytecie Przyrodniczym w Poznaniu uzyskując 382.5 g świeżej masy bakteryjnej.

W ramach realizacji zadania 2 "Opracowanie systemu nadekspresji ChoIDH" przeprowadzono szkolenie mgr inż. Natalii Zawady z zakresu hodowli genetycznie modyfikowanych bakterii na podłożach z antybiotykiem.

W ramach realizacji zadania 3 "Oczyszczanie enzymu i optymalizacja procedury oczyszczania" przeprowadzono i rozstrzygnięto przetarg na komorę beztlenową oraz opracowano projekt zagospodarowania i wyposażenia komory.

PROJEKTY 6. PROGRAMU RAMOWEGO UE

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



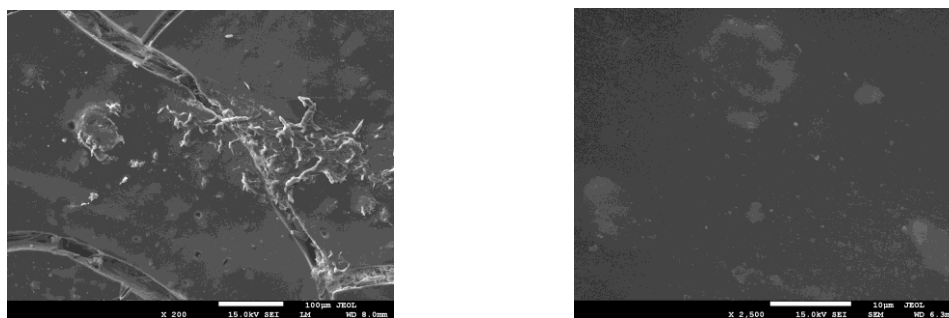
EC 6th FP ERA-NET MNT Projekt SPR NANOREP II [2008-2012]
(kierownik projektu: prof. Piotr Warszyński)

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

W roku 2012 kontynuowano badania mające na celu optymalizację metody modyfikacji nanocząstek krzemionkowych pod kątem kompatybilności z powłokami polimerowymi i tworzywami termoplastycznymi. Dokonano wyboru pochodnych silanowych celem modyfikacji powierzchni nanocząstek. 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 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	SII6455.0 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

Nanocząstki krzemionkowe o średnim rozmiarze 100 nm zmodyfikowane powierzchniowo pochodnymi silanowymi były mieszane z monomerami a następnie prowadzono polimeryzację. Stwierdziliśmy dobrą dyspersję nanocząstek w otrzymanym polimerze. Testy odporności na ścieranie wykazały nieznaczne jej zwiększenie.



Rysunek 1. Obrazy próbki poliamidu-6 zawierającego nanocząstki krzemionkowe modyfikowane AES.

PROJEKTY 7. PROGRAMU RAMOWEGO UE

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



Projekt EC 7th FP NEXT-GTL (IP) [2008-2012]
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Celem projektu jest opracowanie katalizatorów do przeróbki gazu ziemnego. Projekt obejmuje kilka grup zagadnień takich jak: selektywne utlenianie metanu do CH₃OH/DME na katalizatorach opartych na kompleksach karbenowych i heteropolikwasach czy aromatyzacja metanu na katalizatorze opartym o tlenek molibdenu(VI) osadzony w zeolicie ZSM-5: MoO₃/ZSM-5. Rola IKiFP PAN w tym projekcie sprowadza się do syntezy katalizatorów na bazie heteropolikwasów, opisu struktury elektronowej i mechanizmów reakcji badanych układów.

W sprawozdawanym okresie zsyntezowano nową serię związków opartych na heteropolikwasach o strukturze anionu Keggina, zawierających wanad jako element odpowiedzialny za właściwości redoksove badanych układów. Materiały zostały scharakteryzowane za pomocą ICP-OES, XRD i TG / DSC. Układy H_{3-x}(PMo_{12-x}V_x)O₄₀ gdzie (x=0, 1, 2) zostały wybrane jako katalizatory hybrydowe (posiadające właściwości zarówno kwasowe jak i redoksove) mające działać jako składnik utleniający odpowiedzialny za selektywne wprowadzenie tlenu do aktywowanej cząsteczki metanu.

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. Wyniki obliczeń tworzenia wakacji tlenowych (poprzez usunięcie O/OH w anionie Keggina z różnych pozycji strukturalnych) pokazują, że energia tworzenia wakacji jest funkcją położenia (niższe wartości energii desorpcji otrzymuje się dla tlenów mostkowych niż dla tlenów terminalnych) i charakteru koordynowanych sąsiadów metalicznych. Energia wyrwania grupy OH z anionu Keggina jest zawsze niższa niż energia desorpcji atomów tlenu. Dodatkowo rozpoczęto modelowanie procesu aktywacji tlenu molekularnego na zdefektowanych układach heteropolikwasów P_nMeW₁₁O₃₉ⁿ⁻ gdzie Me = Mn, Co, Fe, Cu, Zn. Wstępne wyniki wskazują na brak adsorpcji O₂ w układach z jonami Zn i Cu. W pozostałych układach cząsteczka O₂ po adsorpcji na centrach metalicznych ulega aktywacji. Obserwujemy wydłużenie i osłabienie wiązania O-O.

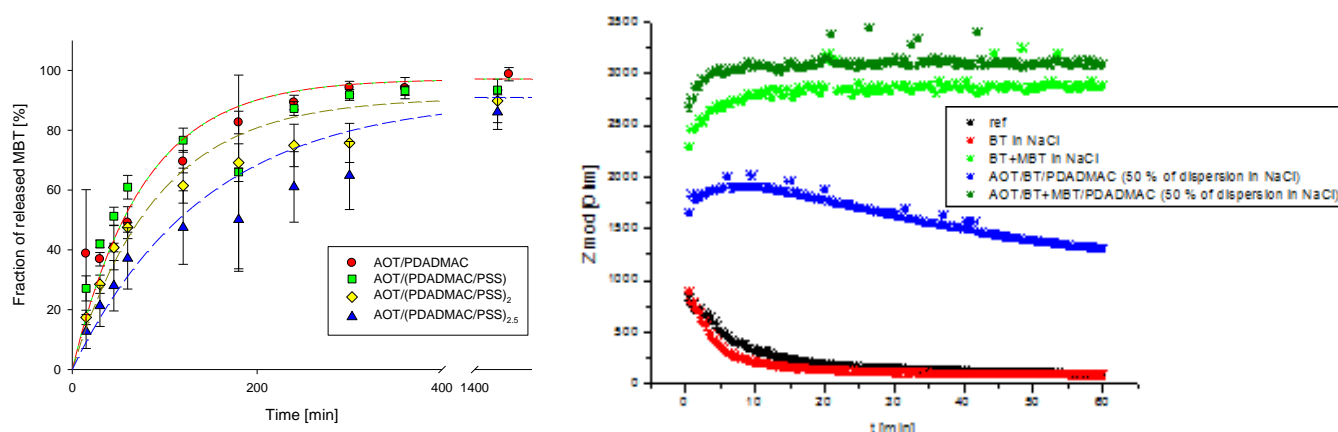
Kontynuowano badania nad optymalizacją procesu aromatyzacji metanu, zachodzącym na katalizatorze MoO₃/ZSM-5. Prowadzone badania miały na celu określenie optymalnej wielkości klastrów i składu fazy aktywnej katalizatora do konwersji metanu w etylen, będącej pierwszym etapem aromatyzacji CH₄ do benzenu. Fazę aktywną początkowo stanowi MoO₃, w trakcie reakcji katalitycznej ulegający redukcji i przemianie do oksokarbidek molibdenu. Skonstruowano różnej wielkości modele tlenku molibdenu(VI) i oksokarbideku molibdenu, mogące mieścić się w porach zeolitu ZSM-5 i badano, jak modyfikują wysokość bariery aktywacji wiązania C-H w metanie. Gdy fazą aktywną jest czysty MoO₃, aktywacja CH₄ odbywa się preferencyjnie na krawędzi klastra zbudowanego z wielu oktaedów molibdenowo-tlenowych. Aktywacja w środkowej części obciążona jest większą barierą energetyczną. Najniższą barierę aktywacji obserwuje się na klastrach zbudowanych z dwu lub trzech oktaedów Mo-O. Gdy skład pierwiastkowy fazy aktywnej ulega zmianie na oksokarbidek molibdenu, wraz ze wzrostem zawartości węgla, w szczególności podstawionego w miejsce dwukrotnie skoordynowanych atomów tlenu, bariera aktywacji wiązania C-H ulega znacznemu obniżeniu.

Projekt EC 7th FP NMP3-LA-2008-214261 MUST (CP) [2008-2012]
(kierownik projektu: prof. 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 2012 było opracowanie metodyki wytwarzania nano- i mikrokapsulek zawierających czynniki antykorozyjne oraz weryfikacja ich skuteczności w ochronie powierzchni stalowych i aluminiowych.

Polielektrolitowe powłoki nano- i mikrokapsulek były tworzone metodą warstwa po warstwie (LBL) poprzez bezpośrednią enkapsulację kropli mikroemulsji lub emulsji uzyskaną na drodze emulsyfikacji membranowej. Jak substancji antykorozyjnych użyto 2-Merkaptobenzotiazolu (MBT) oraz 2-metylobenzotiazolu (BT), który pełnił również rolę fazy olejowej. Do tworzenia kapsulek mikroemulsyjnych użyto 0.1 ml BT w którym rozpuszczano surfaktant AOT o stężeniu 0,34g/ml. Fazę olejową rozprowadzano 200 ml roztworu PDAMAC stale mieszając. Stężenie MBT w fazie olejowej wynosiło 6%. Średni rozmiar kropli otrzymanej mikroemulsji wynosił około 100 nm a zeta potencjał 68 ± 5 mV. Powłoki kapsulek były tworzone metodą nasyceniową używając pary polianion/polikation (PSS/PDADMAC). Wpływ MBT z kapsulek był wyznaczany w trakcie ich dializy w środowisku zasadowym (pH 10 i 13) metodą spektrometrii UV-VIS w zakresie długości fal 190 – 500 nm.

Na Rysunku 1 zilustrowano przykładowe kinetyki wypływu MBT z kapsulek o różnej grubości powłoki polielektrolitowej; po prawej - zależność impedancji mierzonej metoda EIS przy częstotliwości 1 Hz dla powierzchni aluminiowych AA2024 od czasu w roztworach zawierających mikrokapsułki BT i BT+MBT.



Rysunek 1. Po lewej - Kinetyki wypływu MBT z kapsulek o różnej grubości powłoki polielektrolitowej; po prawej - zależność impedancji mierzonej metoda EIS przy częstotliwości 1 Hz dla powierzchni aluminiowych AA2024 od czasu w roztworach zawierających mikrokapsułki BT i BT+MBT.

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

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



Wysokohydrauliczne spoiwa, znane jako cementy naturalne lub romańskie, były kluczowymi materiałami stosowanymi na masową skalę do dekorowania elewacji budowli w XIX i początku XX wieku, okresie szybkiego 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 zadaniami zakończonego projektu ROCARE były: zwiększenie skali produkcji, badania laboratoryjne służące pełnemu zrozumieniu optymalnych warunków przygotowania i stosowania zapraw, oraz szerokie działania informacyjne.

W okresie sprawozdawczym zakończono główne zadanie badawcze instytutu - wyjaśnienie mechanizm spękań skurczowych zaczynów i zapraw romańskich. Zasadniczym aspektem tego mechanizmu jest powolne narastanie naprężeń w czasie skurczu schnących warstw zaprawy. W takiej sytuacji znajdują się wyprawy tynkarskie, które po nałożeniu na podłoże ceglane i po odpowiednio długiej pielęgnacji są wystawione na otoczenie o obniżonej wilgotności względnej. Stąd zbadano relaksację naprężeń w wysychających, zatrzymanych w ruchu zaczynach i zaprawach romańskich. Nie zaobserwowano pęknięcia żadnej zaprawy, niezależnie od czasu pielęgnacji i zależnego od tego czasu całkowitego skurczu wysychania. Zmierzone stopień spadku maksymalnego naprężenia w stosunku do naprężenia, jakie odpowiada zahamowanemu skurczowi zaprawy bez uwzględnienia efektu relaksacji. W odróżnieniu od zapraw, wszystkie zaczyny ulegały spękaniu podczas skurczu wysychania, na który nałożono więzy. Wskazuje to na skurcz większy od wydłużenia krytycznego, nawet w sytuacji gdy powolne narastanie naprężeń zwiększa odkształcalność materiału.

Instytut był odpowiedzialny za realizację Pakietu Zadań 3 "Upowszechnianie i marketing". W okresie sprawozdawczym zrealizowano dwa kluczowe działania upowszechniające wyniki. Przygotowano i udostępniono na witrynie projektu <http://www.rocare.eu/> podręcznik dobrych praktyk w stosowaniu cementów romańskich. Podręcznik przygotowano tak, aby optymalnie informował i budził zainteresowanie odbiorców badań. Jego struktura i zawartość ma na celu klarowną prezentację informacji naukowych dla praktyków w zakresie konserwacji zabytków. Części 1-3 są ogólnymi rozdziałami dotyczącymi historii, wytwarzania, chemii i stosowania cementów romańskich. Obszerna część 4 - słownik objawów niszczenia i zabiegów konserwatorskich - ma szczególnie znaczenie, gdyż tworzy wspólny język opisu objawów niszczenia sztukaterii romańskich i sprzyja w ten sposób dobrej komunikacji pomiędzy przedstawicielami nauki i praktyki konserwatorskiej. Podobnie część 5 - często zadawane pytania - jest narzędziem prezentacji badań nad fizycznymi i mechanicznymi właściwościami materiałów opartych na romańskich cementach, w sposób dostosowany do praktyki.

Drugim kluczowym działaniem upowszechniającym wyniki była międzynarodowa konferencja "Cementy naturalne w dziedzictwie europejskim: historia, właściwości, stosowanie i konserwacja" zorganizowana wspólnie z ICOMOS Francja i francuskim Laboratorium Badań nad Zabytkami, przy wsparciu Ministerstwa Kultury i Przekazu Francji. Konferencja skupiła się na francuskich cementach naturalnych ze szczegółową prezentacją dwóch historycznych centrów produkcji w regionach Rhône-Alpes i Marsylii, oraz na wynikach badawczych i aplikacyjnych projektu ROCARE. Dwujęzyczny angielsko/francuski zbiór abstraktów oraz wszystkie prezentacje udostępniono na witrynie projektu ROCARE.



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

Projekt 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

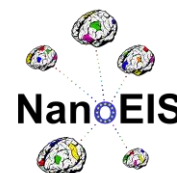
Jednym z dwóch kluczowych celów projektu F3 jest opracowanie nowej technologii produkcji przemysłowej opartej na modułowej, uniwersalnej oraz elastycznej instalacji, na instalacji mogącej służyć nie tylko jednemu dedykowanemu procesowi lecz instalacji adoptowalnej do wielu procesów produkcyjnych. W osiągnięciu 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 2012 skupiliśmy się na badaniach adsorpcji polimeru PAA w obecności zanieczyszczeń pozostałych po procesie polimeryzacji. Badania prowadzono za pomocą mikrowagi kwarcowej QCM (adsorpcja na powierzchni złota) oraz badań adsorpcji na cząstkach koloidalnych CaCO₃. Wykazano, że badane zanieczyszczenia nie wpływają na proces adsorpcji w stężeniach do 5000 ppm.

5. NanoIES Nanotechnology Education for Industry and Society

Projekt EC FP7-NMP-2012-CSA-6 NanoIES (CSA) [2012-2015]
(kierownik projektu: prof. Józef Korecki, dr Dorota Rutkowska-Żbik)



Nanotechnologia jest nową, dynamicznie rozwijającą się dziedziną wiedzy o dużym znaczeniu dla społeczeństwa i gospodarki europejskiej. Nauczanie nanotechnologii - ze względu na jej interdyscyplinarną naturę, czyli konieczność łączenia selektywnej wiedzy z różnych dziedzin nauki - stanowi duże wyzwanie dla istniejących rozwiązań edukacyjnych. Obecne systemy, zasadniczo ukształtowane wokół tradycyjnych dyscyplin naukowych, stoją obecnie przed koniecznością włączenia w swój nurt nauczania przedmiotu o charakterze interdyscyplinarnym.

Głównymi celami projektu NanoEIS są:

- a) sformułowanie ogólnych rekomendacji dla podstaw programowych (które odpowiadać będą na realne potrzeby pracodawców) i określenie tzw. "najlepszych praktyk" ich zastosowania;
- b) ocena sposobu, w jaki edukacja w dziedzinie nanotechnologii została włączona w program nauczania na poziomie szkół średnich i szkolnictwa wyższego;
- c) opracowanie materiałów szkoleniowych i oceniających dla potrzeb nowoczesnego kształcenia w dziedzinie nanotechnologii.

IKiFP PAN zaangażowany jest w ocenę edukacji w dziedzinie nanotechnologii na poziomie studiów wyższych (z naciskiem na trzeci stopień kształcenia) i opracowanie materiałów szkoleniowych (w tym zadaniu Instytut pełni rolę partnera wiodącego - WP leader).

W trakcie dwóch pierwszych miesięcy projektu powołano Management Board oraz Advisory Board. Uzgodniono treść i podpisano umowę konsorcyjną. Rozpoczęto ewaluację polskiej podstawy programowej w dziedzinie edukacji przyrodniczej oraz kierunków studiów pod kątem treści zawierających odniesienie do nanotechnologii.

PROJEKTY EU COST ACTION

1. Colloidal Aspects of Nanoscience for Innovative Processes and Materials



Projekt EU COST Action CM1101 [2012-2016]

(koordynator: prof. Piotr Warszyński,

przedstawiciel instytucji koordynującej: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

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

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

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

W 2012 roku zorganizowano kilka spotkań w ramach Grup Roboczych (WG) m.in. spotkanie w Sofii, Bulgaria - "*Discussion on Hydration Forces*", w Krakowie, Polska "*Bubble and Drop Interfaces 2012*", w Barcelonie, Hiszpania "*Nano-biocolloidal materials and non-equilibrium self-assembly*". Coroczna konferencja Akcji COST odbyła się podczas konferencji ECIS 2012 w Malmo, Szwecja. W Regensburgu w Niemczech zostały zorganizowane warsztaty dla studentów pod nazwą "*CM1101 Training School on Interfaces*". Europejska szkoła letnia pod nazwą "*The 11th European Summer Training School on Scattering Methods Applied to Soft Condensed Matter*" była częściowo finansowana przez Akcję COST. Dodatkowo zorganizowano 10 STSM – krótkie staże dla naukowców. Została założona oficjalna strona Akcji, którą można znaleźć pod adresem: <http://projects.um.edu.mt/cm1101/> .

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 Materia land 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. Obecnie projekt wkracza w decydującą fazę realizacji, która powinna w przyszłym roku zaowocować ze strony Instytutu pięcioma pracami doktorskimi:

1. Promotor: prof. Ewa Brocławik, doktorant: mgr Anna Wójcik "Computer modeling of biological nanostructures". Doktorantka przebywała na stażu w Sztokholmie do 30 kwietnia 2012
2. Promotor: prof. Piotr Warszyński, doktorant: mgr inż. Małgorzata Adameczak "Surfactants, polyelectrolytes and nanoparticles as building blocks for surface nanostructures". Doktorantka przebywa w norweskim ośrodku SINTEF od 1 września 2012
3. Promotor: prof. Kazimierz Małyśa, doktorant: mgr inż. Dominik Kosior "Nanostructures and stability of thin liquid layers". Od września 2012 do marca 2013 doktorant przebywa na stażu w Niemczech.
4. Promotor: prof. Wiesław Łasocha, doktorant: mgr inż. Katarzyna Luberda-Durnaś "Hybrid organic-inorganic layered materials - precursors of semiconducting nanostructures". Doktorantka finalizuje pracę doktorską i rozpoczęła jej redakcję.
5. Promotor: prof. Józef Korecki, doktorant: mgr inż. Ewa Młyńczak "Surface and interface properties of metal-oxide magnetic nanostructures". Przewód doktorski otwarto 12 stycznia 2012. P. Ewa Młyńczak brała udział w pomiarach synchrotronowych. Praca planowana jest w formie zbioru publikacji, do tej pory ukazały się dwie publikacje.

W 2012 doktoranci byli współautorami pięciu publikacji w czasopiśmie notowanych w bazie JCR i zaprezentowali 16 referatów na krajowych i międzynarodowych konferencjach. 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)

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

II rok

- K. Kubiak (promotor: prof. Z. Adamczyk) Synteza nowych materiałów warstwowych na bazie nanocząstek srebra, aktywnych w procesach selektywnego wiązania białek
- Ł. Kuterasiński (promotor: dr hab. M. Derewiński prof. IKiFP) Hierarchiczne materiały porowate jako podstawa nowoczesnych procesów przemysłu rafineryjnego

III rok

- P. Batys (promotor: dr hab. P. Weroński prof. IKiFP) Opis powierzchni i transportu w układach wielowarstwowych nanocząstek
- D. Dziejicka (promotor: prof. B. Sulikowski) Modyfikowane zeolity jako katalizatory transformacji terpenów
- M. Grzesiak (promotor: prof. W. Łasocha) Struktury typu `MOF` - materiały dla katalizy i inżynierii krystalicznej
- Ż. Kalemba-Jaje (promotor: dr hab. A. Drelinkiewicz prof. IKiFP) Trasnestyfikacja triglicerydów metanolem w obecności stałych polimerowych katalizatorów kwasowych
- M. Miłaczewska (promotor: dr hab. T. Borowski prof. IKiFP) Badania nad strukturą i mechanizmem katalitycznego działania wybranych metaloenzymów niehemowych;
- P. Niemiec (promotor: dr hab. R. Tokarz-Sobieraj prof. IKiFP) Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów
- Szymańska (promotor: prof. W. Łasocha) Nowe polimetalany i peroksokompleksy jako materiały do zastosowań w katalizie, medycynie i przemyśle
- D. Szepietowska (promotor: prof. B. Sulikowski) Wybrane sole heteropolikwasów jako katalizatory transformacji terpenów
- M. Tatko (promotor: dr hab. P. Nowak prof. IKiFP) Nowe materiały na podstawie tlenków metali ziem rzadkich o wysokim przewodnictwie jonowym do zastosowania w wysokotemperaturowych ogniach paliwowych

IV rok

- J. Dziejic (promotor: prof. P. Warszyński) Fotokatalityczny rozkład związków organicznych w roztworach wodnych wspomagany enkapsulowanymi utleniaczami
- M. Krzak (promotor: dr hab. P. Nowak prof. IKiFP) Wysokosprawne pokrycia antykorozyjne z materiałów kompozytowych na podstawie polimerów organicznych
- M. Nosek (promotor: dr hab. P. Weroński prof. IKiFP) Analiza porowatości wielowarstwowych materiałów koloidalnych o kontrolowanej architekturze
- M. Oćwieja (promotor: prof. Z. Adamczyk) Kinetyka tworzenia oraz struktura nanocząstek srebra na powierzchniach heterogenicznych

- K. Onik (promotor: dr hab. M. Derewiński prof. IKiFP) Nowe materiały hierarchiczne oparte na nanoklasternach zeolitów jako podstawa nowoczesnych układów katalitycznych
- Pajor (promotor: prof. P. Warszyński) Elektroaktywne wielowarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowanymi nanocząstkami

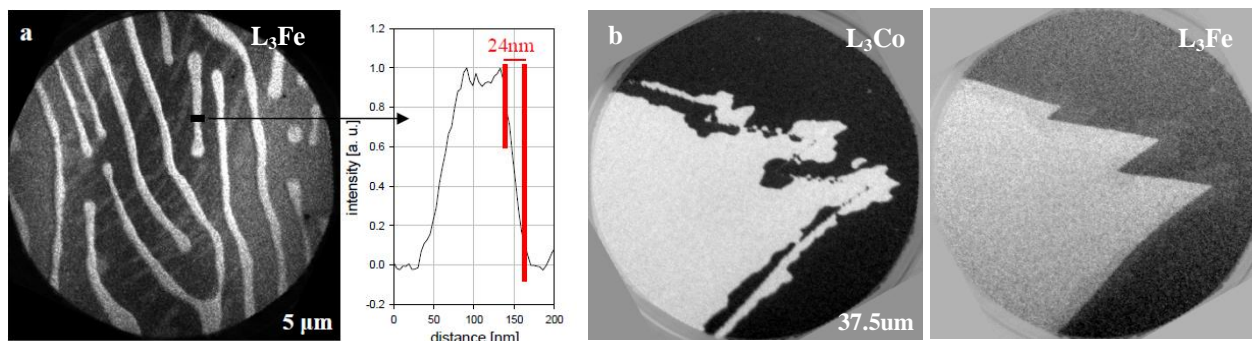
Uruchomienie i testowanie mikroskopu PEEM przy synchrotronie

Celem zadania było przystosowanie do pracy przy synchrotronie oraz przetestowanie w reżimie X-PEEM fotoemisyjnego mikroskopu elektronowego z analizatorem energii (SPE-PEEM III firmy ELMITEC), zakupionego w ramach projektu SPINLAB.

W ramach zadania zakupiono próżniowe elementy optyczne oraz mechaniczne niezbędne do przystosowania mikroskopu do pracy w warunkach promieniowania synchrotronowego. Ponadto mikroskop rozbudowano o dodatkową komorę UHV, umożliwiającą przygotowywanie oraz charakteryzację próbek *in situ*, wyposażoną w system do preparatyki warstw epitaksjalnych, spektrometr LEED-AES, wagę kwarcową, działło jonowe oraz kwadrupolowy spektrometr masowy. Dodatkowo komorę obrazującą mikroskopu wyposażono w naporowywarę pozwalającą na nanoszenie materiału w trakcie obrazowania. Mikroskop zainstalowano przy szwajcarskim synchrotronie SLS przy wiązce NanoXAS, gdzie przeprowadzono testy weryfikujące parametry urządzenia w dostępnych trybach pracy takich jak: obrazowanie z kontrastem chemicznym (XAS-PEEM, XPS-PEEM), obrazowanie z kontrastem magnetycznym (XMCD-PEEM, MLD-PEEM) oraz mikro-spektroskopie (uXAS, uXMCD, uXMLD, uXPS).

Pomiary testowe (6 tygodni na wiązce NanoXAS) prowadzono w szerokim zakresie temperatur (~100K - ~1200K) na szerokiej gamie modelowych próbek, preparowanych zarówno *in situ*, jak i poza układem, takich jak wielowarstwy, układy strukturyzowane czy samoorganizujące się nanostruktury. Typowa zdolność rozdzielcza dla zbieranych obrazów wynosiła ok. 50 nm. Najlepsza wartość uzyskana w testach wyniosła 24 nm (Rys. a). Intensywność zbieranego sygnału w reżimie absorpcyjnym pozwalała na obserwowanie procesów zachodzących na powierzchni w czasie rzeczywistym zarówno z czułością chemiczną jak i magnetyczną. Dobrą czułość magnetyczno-chemiczną uzyskiwano także z warstw leżących nawet 5nm pod powierzchnią próbki (Rys. b). Należy podkreślić, że obrazowano domeny zarówno ferromagnetyczne, jak i antyferromagnetyczne.

Próbki przygotowywano pod kątem kilkunastu konkretnych projektów badawczych. Wyniki zostaną opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych oraz będą wykorzystane w pracy doktorskiej.



a) Obraz XAS-PEEM zebrany na krawędzi L_3Fe , przedstawiający wyspy Fe preparowane na monokryształach W(110), reprezentujący najlepszą zdolność rozdzielczą uzyskaną w testach. Obok profil intensywności z zaznaczoną zdolnością rozdzielczą przy zastosowaniu kryterium 84%-16%. b) Obrazy XMCD-PEEM zebrane na krawędziach L_3Co oraz L_3Fe z tego samego miejsca na próbce, przedstawiające domeny magnetyczne w układzie 2nmCo/~3nmAu/20nmFe/W(110). Sygnał zebrany na krawędzi L_3Fe pochodzi od warstwy żelaznej leżącej ~5nm pod powierzchnią.

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)

Zad. 6. Biokatalityczne metody syntezy alkoholi chiralnych

Przeprowadzono badania nad dwoma systemami enzymatycznymi katalizującymi syntezę chiralnych alkoholi alkiloaromatycznych: dehydrogenazą etylobenzenową (EBDH) i dehydrogenazą fenyloetanową (PEDH). Pierwszym celem badań było opracowanie modeli reaktywności obu enzymów z wykorzystaniem metodologii QSAR oraz sieci neuronowych i rozpoczęcie modelowania mechanizmu reakcji obu enzymów w oparciu o badania kinetyczne i modele reaktywności. Drugim celem było przygotowanie się do immobilizacji enzymów (poprzez przygotowanie odpowiedniej ilości materiału biologicznego) oraz immobilizacja enzymów na nośnikach i przeprowadzenie ich testów w warunkach procesowych.

Do modelowania reaktywności EBDH zastosowano metodologię opracowaną wcześniej, polegającą na powiązaniu własności fizykochemicznych substratów z eksperymentalnie zmierzonymi szybkościami reakcji początkowej za pomocą sieci neuronowych. Uzyskano modele przewidujące rSA z 95% skutecznością i różnicujące inhibitory i substraty. W przypadku PEDH zastosowano podejście alternatywne. Ze względu na skomplikowany układ reakcyjny (katalizator w formie całych komórek, układ z regeneracją kofaktora) przeprowadzono serię eksperymentów konwersji różnych substratów w reaktorze okresowym, mieszalnikowym startując z 50 mM stężenia substratu. Przebadano kinetykę konwersji substratu dla produktu dla acetofenonu i jego 4-Br, 4-OCH₃, 4-F, 4-NO₂, 4-Cl, 4-Ph, 4-Et, 4-OH, 4-mesylo pochodnych a następnie zbudowano model neuronowy przewidujący konwersję w czasie z wykorzystaniem parametrów opisujących substrat (efekty elektronowe i hydrofobowe) oraz parametry reaktora (czas konwersji, stężenie początkowe).

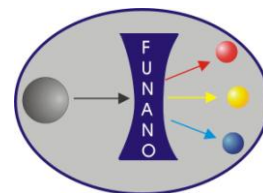
W celu pozyskania materiału do badań i immobilizacji przeprowadzono zleconą hodowlę i nadekspresję PEDH w *E.coli* (200 l). Tak pozyskany materiał oczyszczono i przeprowadzono immobilizację kowalencyjną na nośnikach pozyskanych od partnerów projektu. Immobilizację przeprowadzono na materiałach krzemionkowych (SBA-S, MCF, MH) uzyskując materiały o aktywności enzymatycznej w zakresie 30-50% wartości początkowej. Materiały te wykazywały dużą stabilność na przechowywanie i wielokrotne wykorzystanie w krótkiej reakcji enzymatycznej. Przetestowano również modyfikowane nośniki granocelowe, które pozwalały na uzyskanie materiałów o mniejszej aktywności końcowej 14-35%. Najlepszy z otrzymanych materiałów, granocel modyfikowany grupami DEAE z diwinylosulfonem jako grupą łączącą, pozwalał na 5 kolejnych konwersji acetofenonu z tym samym katalizatorem na poziomie ok. 50 mM z zachowaniem 50% początkowej aktywności. Testy przeprowadzono w okresowym reaktorze mieszalnikowym wykorzystując HPLC do monitorowania postępu reakcji.

W przypadku EBDH przeprowadzono badania na nośnikach krzemionkowych. Testy wykazały, że układ reakcyjny jest niekompatybilny z materiałami zmodyfikowanymi grupami aminowymi, które ulegały utlenieniu w roztworze zawierającym akceptor elektronowy. Niestety również zastosowanie materiałów krzemionkowych z grupami glicydyłowymi nie wykazało efektywnego wiązania enzymu. W związku z tym zimmobilizowano enzym na utlenionych materiałach krzemionkowych zmodyfikowanych grupami aminowymi, co pozwoliło na uzyskanie materiałów o 3 krotnie większej aktywności względem nośnika nieutlenionego. Zbadano również inne czynniki stabilizujące enzym takie jak temperatura immobilizacji, stężenie elektrolitu (NaCl), obecność produktu w roztworze (stabilizacja struktury centrum aktywnego).

Uzyskane wyniki pozwoliły na identyfikację parametrów wpływających na szybkość reakcji co może ułatwić planowanie konwersji w większej skali (modele PEDH) oraz pozwoli na lepsze zrozumienie mechanizmu reakcji katalizowanej przez EBDH. Badania przeprowadzone na układzie wykorzystującym całe komórki oraz białka immobilizowane umożliwiły łatwą zwiększenia skali syntezy i wyodrębnienia czystych alkoholi chiralnych.

5. FUNANO: Funkcjonalne nano i mikrocząsteczki

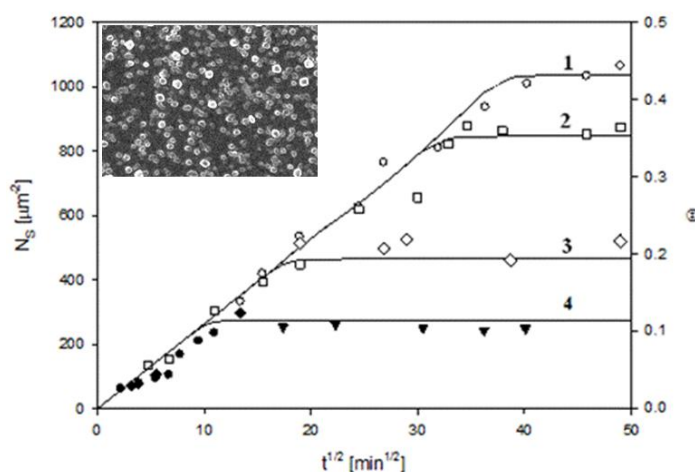
- synteza oraz zastosowania w innowacyjnych materiałach i technologiach



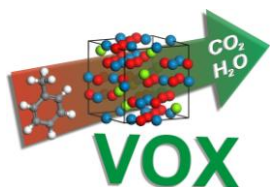
POIG 2.1.1 [2009-2014] FUNANO

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Hematyt, najbardziej stabilny z tlenków żelaza, jest szeroko stosowany jako pigment syntetyczny oraz dodatek antykorozyjny. Znajduje też zastosowanie w procesach katalitycznych, np. w syntezie Fischera –Tropscha, w procesach odsiarczania gazu ziemnego, utleniania alkoholi, wytwarzaniu butadienu, itp. Jest również istotnym komponentem ogniw fotowoltaicznych oraz jest używany w procesach fotodegradacji chlorofenoli. Cienkie filmy nanocząstek hematytu osadzonych na różnych powierzchniach stałych, mogą służyć jako sensory wilgotności, elektrody w bateriach litowych, fotoanody itp. W ramach prowadzonych prac dokonano syntezy monodispersyjnych nanocząstek hematytu według zmodyfikowanej metody Matijević opartej na hydrolizie chlorku żelazawego w środowisku kwaśnym. Zaletą tej metody jest wyeliminowanie stabilizatorów polimerycznych, wywierających negatywny wpływ na procesy osadzania cząstek na powierzchniach stałych. Przeprowadzono obszerną charakterystykę fizykochemiczną tych suspensji i wykazano, że są stabilne w długim okresie czasu. Przeprowadzono pomiary kinetyki osadzania nanocząstek hematytu (o średnim rozmiarze 22 nm) w warunkach transportu dyfuzyjnego na powierzchnie miki (Rys. 1). Stężenie powierzchniowe wyznaczano w sposób bezpośredni przez zliczanie ilości cząstek na określonych obszarach przy użyciu mikroskopii AFM oraz mikroskopii skaningowej (SEM). Uzyskano homogeniczne filmy hematytu o wysokim stopniu pokrycia cząstkami, sięgającym 45% (dla siły jonowej $3 \cdot 10^{-2}$ M), co przekracza w znaczący sposób wartości uzyskane dotychczasowe w literaturze przedmiotu. Warto zaznaczyć, że zarówno kinetyka, jak również pokrycie maksymalne nanocząstek hematytu zgadzały się dobrze z przewidywaniami teoretycznymi wynikającymi z modelu randomalnej, sekwencyjnej adsorpcji (linie ciągłe na Rys. 1). Ma to istotne znaczenie, gdyż monowarstwy te wykazują dodatni ładunek powierzchniowy dla $\text{pH} < 9$, a więc mogą być używane jako efektywne nośniki katalityczne dla nanocząstek metali szlachetnych (srebra, złota, platyny) wykazujących ujemny ładunek powierzchniowy dla tego zakresu pH.



Rysunek 1. Kinetyka osadzania nanocząstek hematytu na powierzchni miki dla różnych sił jonowych wyznaczona przy pomocy metody AFM (punkty wypełnione) oraz SEM (punkty puste). Średni rozmiar cząstek 22 nm (DLS), warunki osadzania: $\text{pH} = 3.5$, $T = 293$ K, stężenie cząstek wewnątrz $c_b = 20$ ppm. Punkty przedstawiają wyniki doświadczalne uzyskane dla: 1) (●,○) $I = 3 \times 10^{-2}$ M, 2) (□) $I = 10^{-2}$ M, 3) (◆,◇) $I = 10^{-3}$ M, 4) (▼) $I = 10^{-4}$ M. Linie ciągłe przedstawiają wyniki teoretyczne obliczone z modelu randomalnej sekwencyjnej adsorpcji. W górnej części rysunku przedstawiono zdjęcie SEM monowarstwy nanocząstek hematytu na powierzchni miki.



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

PO IG 2.1.1. [2009-2013] VOX

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

Celem projektu jest opracowanie technologii otrzymywania skutecznych i niedrogich katalizatorów tlenkowych do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych z toksycznych gazów i par organicznych. Formuły katalizatorów projektowane są w oparciu o koncepcję wykorzystania właściwości syntetycznych minerałów warstwowych, izomorficznych 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 2012 kontynuowano i zakończono optymalizację składu katalizatora oraz warunków jego 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. Na podstawie testów katalitycznych przeprowadzonych w skali laboratoryjnej wybrano dwie najbardziej obiecujące do testów w instalacji pilotowej. W kolejnym etapie przystąpiono do syntezowania dużych ilości fazy aktywnej wg wybranych receptur, w celu wytworzenia czterech 50-kiologramowych szarż katalizatora monolitycznego przeznaczonego do testów w skali technicznej.

7. ISD MOLMED Nauki Molekularne dla Medycyny

PO KL 4.1.1. [2010-2015] ISD MOLMED
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)



Projekt Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie "Nauki molekularne dla medycyny" jest realizowany w ramach Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki, 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. Małgorzatę Witko z IKiFP PAN. W projekcie uczestniczą następujące jednostki partnerskie: Wydział Chemii UJ, Wydział Lekarski UJ CM, 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 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 2012 roku w ramach projektu zrealizowano następujące zadania:

- zgodnie z programem ramowym studiów rozpoczęła się realizacja cyklu wykładów "Techniki doświadczalne w naukach molekularnych" oraz "Choroby cywilizacyjne"
- w II kwartale zorganizowano 5-dniowe wyjazdowe warsztaty naukowe dla doktorantów z udziałem zaproszonych wykładowców w Ochojcu Dolnej
- w III kwartale ogłoszono i rozstrzygnięto konkurs na staże typu post-doc dla pracowników jednostek biorących udział w projekcie. W wyniku konkursu wyłoniono 4 osoby, które realizowały staże przez 3 miesiące.
- w IV kwartale rozpoczął się kurs języka angielskiego dla kadry naukowej w ramach podnoszenia jej kwalifikacji językowej. W kursie uczestniczy 20 osób – pracowników jednostek partnerskich projektu

W ramach ISD doktoranci prowadzą badania naukowe w jednostkach partnerskich, otrzymują miesięczne stypendia oraz dokonują zakupów materiałów niezbędnych do realizacji prac doktorskich. Ponadto biorą udział w konferencjach naukowych krajowych i zagranicznych, na których prezentują wyniki swoich badań w postaci wystąpień ustnych i posterów. Nad przebiegiem realizacji projektu czuwa Rada Programowa składająca się z 8 członków – po dwóch reprezentantów z każdej jednostki partnerskiej.

INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE

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

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Austrii [2009-2012]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Zakończono trwający trzy lata projekt (finansowanie dotyczyło dwóch lat ze względu na urlop macierzyński głównej partnerki ze strony austriackiej), który miał na celu badanie właściwości strukturalnych, elektronowych i magnetycznych nanostruktur Fe i adsorbentu z fazy gazowej na powierzchni W(110) przy pomocy spektroskopii oddziaływań nadsubtelnych.

Adsorpcję tlenu molekularnego na powierzchni Fe(110) badano standardowymi metodami powierzchniowymi: dyfrakcja elektronów niskoenergetycznych (LEED) i spektroskopią elektronów Augera (AES), a także metodami jądrowymi, za pomocą spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji (CEMS) oraz jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (NRS).

Zidentyfikowano struktury adsorpcyjne tlenu, w tym takie, które nie były do tej pory obserwowane. Struktura (2x2), która odpowiada pokryciu 0.25 i występuje przy ekspozycji na tlen od 0.4 do 1.2 L Langmuira (L), pojawia się także na skutek adsorpcji gazów resztkowych. Przy dalszym dozowaniu tlenu (~5 L) do układu obserwowano obrazy LEED określane w literaturze jako c(3x1) lub „split c(3x1). W rzeczywistości struktura zidentyfikowana w niniejszej pracy odpowiada dużej skośnej komórce elementarnej, a bogata, nierozwiązana do tej pory struktura refleksów została zinterpretowana jako pochodząca od dwóch różnych zwierciadlanych domen strukturalnych. Dalsza ekspozycja (~10 L) pozwoliła zaobserwować nową, dotychczas nie opisaną w literaturze, nadstrukturę adsorbentu widzianą w LEED jako (3x2) odpowiadającą pokryciu 0.66 ML. Dopiero od ekspozycji rzędu 100-200 L obrazy LEED zaczynają wykazywać zmianę symetrii w kierunku sześciokrotnej, co jest interpretowane jako początek tworzenia się fazy tlenkowej.

Struktura elektronowa odpowiadająca różnym fazom adsorpcyjnym badana była metodą NRS w ESRF Grenoble na wiązce ID18. Stwierdzono, że dla struktury (2x2) efektem sąsiedztwa atomów tlenu jest redukcja powierzchniowych gradientów pól elektrycznych, natomiast dla początkowych faz adsorpcji nie ulegają istotnej modyfikacji powierzchniowe momenty magnetyczne. Dopiero w drugiej fazie odpowiadającej strukturze (3x2) obserwuje się istotną zmianę charakteru widma, która świadczy o transferze ładunku z żelaza do tlenu. Oznacza to, że mamy do czynienia z początkiem tworzenia się silnych wiązań chemicznych żelazo-tlen, czyli z pierwszymi stadiami utleniania.

W projekcie porównano też reaktywność powierzchni Fe(110) z reaktywnością pseudomorficznej monowarstwy Fe na powierzchni W(110). Stwierdzono, że reaktywności pierwszej i drugiej monowarstwy Fe są różne i że charakterystyczna struktura (2x2) występuje tylko na drugiej warstwie, a jedyną strukturą adsorpcyjną tlenu na monowarstwie żelaza jest w początkowych stadiach adsorpcji struktura (3x2).

Rezultatem projektu są wyniki badań dotyczące adsorpcji tlenu na powierzchni Fe(110), adsorpcja tlenu na monowarstwie Fe/W(110) oraz morfologii i właściwości magnetycznych ultracienkich warstw i nanostruktury Fe na W(110).

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

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Austrii [2012-2013]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Celem projektu jest poszukiwanie korelacji pomiędzy szeroko pojętą strukturą i morfologią, a przebiegiem i kinetyką powierzchniowych reakcji dla modelowych katalizatorów, którymi są metaliczne i tlenkowe nanostruktury otrzymywane na podłożach monokrystalicznych. Końcowym efektem projektu będzie określenie reaktywności oraz kinetyki reakcji katalitycznych w zależności od struktury i orientacji powierzchni, jej morfologii oraz składu chemicznego.

Realizacja projektu jest uzależniona od finansowania przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu Harmonia.

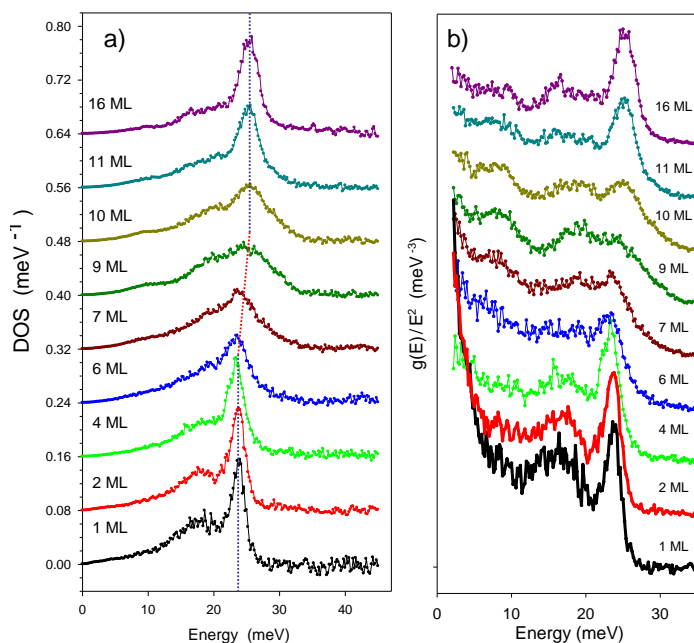
3. Epitaksjalne nanostruktury, metaliczne i tlenkowe, badane przy pomocy jądrowego, rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Francji Program POLONIUM [2010-2012]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Zakończono trwający dwa lata projekt, którego celem było zastosowanie jądrowego rezonansowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego (NRS) do badań struktury elektronowej i dynamiki sieci krystalicznej epitaksjalnych nanostruktur metalicznych i tlenkowych. We współpracy z grupą wiązki ID 18 w European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) Grenoble od kilku lat prowadzona jest współpraca dotycząca badania nanostruktur metodą NRS *in situ*, w warunkach ultra wysokiej próżni, z wykorzystaniem aparatury, która powstała w ramach projektu DYNASYNC w 6. Ramowym Programie Unii Europejskiej.

Ostatnia faza projektu dotyczyła analizy widm fononów dla epitaksjalnych warstw FeO na powierzchni platyny Pt(111). Fononowe gęstości stanów uzyskane z pomiarów NIS dla epitaksjalnych warstw FeO na Pt(111), w funkcji grubości warstw znajdują się na Rys. 1. W całym zakresie grubości widma fononowe znacznie odbiegają od charakterystyki litego FeO. Najbardziej charakterystyczne cechy DOS pokazanych na Rys. 1 to: (i) ostry pik i gwałtowne odcięcie stanów w wysokoenergetycznej części widm dla najcieńszych i najgrubszych warstw, (ii) wyraźna korelacja między rozmyciem i poszerzeniem widma dla pośrednich grubości (6-10 ML) a magnetyzmem pojawiającym się w tym samym zakresie grubości, (iii) utwardzenie fononów powyżej grubości magnetycznej anomalii, zilustrowane na Rys. 1 pionowymi kropkowanymi liniami, które wizualizują przesuwanie się głównego pikę gęstości stanów fononowych ze wzrostem grubości oraz (iv) znaczące podbicie f-DOS w obszarze energii $E < 10$ meV dla najcieńszych warstw (1 ML i 2 ML). Wyjaśnienie takiego zachowania jest szczególnie strukturą pierwszej i drugiej monowarstwy FeO na Pt(111). Duże niedopasowanie odległości międzyatomowych w płaszczyznach FeO(111) i Pt(111) i wynikające z tego olbrzymie epitaksjalne naprężenia znajdują ujście w relaksacyjnych zmianach strukturalnych.



Rysunek 1. Znormalizowane fononowe gęstości stanów dla warstw FeO na Pt(111) w funkcji grubości warstw (po lewej) oraz zredukowane przez podzielenie przez kwadrat energii (po prawej).

INNE ZADANIA

1. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ



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

W 2012 roku zakres akredytacji laboratorium CezaŚ (AB 1221) obejmował pomiary 4 akredytowanymi metodami badawczymi. Ponadto wykonywano pomiary 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 nie stwierdzono niezgodności z wymaganiami.

W omawianym okresie sprawozdawczym laboratorium CezaŚ zrealizowało:

1. 3 zlecenia z zakresu akredytowanego (2 zewnętrzne i 1 z Instytutu) na łączną kwotę 3071,31 zł (2497,00 zł + VAT). Zlecenia obejmowały pomiary:
 - konwersji lotnych zanieczyszczeń organicznych w zakładach przemysłowych,
 - stężenia i składu chemicznego zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych,
 - emisji gazowych zanieczyszczeń organicznych oraz sprawności rewersyjnych reaktorów katalitycznych.
2. 14 zleceń wewnętrznych z IKiFP PAN, obejmujących 21 różnych serii pomiarowych (na 1883 próbkach) metodami:
 - chromatografii gazowej z detekcją masową,
 - spektroskopii w zakresie środkowej i bliskiej podczerwieni, z wykorzystaniem przystawek DRIFT i ATR oraz metodą transmisyjną,
 - chromatografii ciekłej z detekcją UV.

W okresie sprawozdawczym laboratorium CezaŚ przystąpiło do porównania międzylaboratoryjnego obejmującego pomiary stężenia LZO (całkowitego węgla organicznego wg normy PN-EN 13526:2005) oraz pomiary własności fizykochemicznych oraz składu nieenergetycznych gazów odlotowych za pomocą urządzenia TESTO 350M/XL (wg PB-01 wydanie 3 z 12.01.2011). Wyniki laboratorium uzyskane wg PB-01 oraz pomiary LZO oceniono jako zadawalające, co potwierdziło kompetencje laboratorium w porównywanym zakresie.

2. The formation of amyltetrahydroanthraquinone with palladium-polyaniline-silica catalyst, and the study of the chemistry under deep hydrogenation conditions of the working solution used for the hydrogen peroxide amylanthraquinone process

Prace dla Solvay Research and Technology, Brussels (Belgia)

(kierownik prac: dr hab. Alicja Drelinkiewicz prpf IKiFP)

Badania wykonane w projekcie obejmowały syntezę i charakteryzację właściwości fizykochemicznych (metody BET, XRD, XPS, sorpcja amoniaku, mikroskopia elektronowa) nośnikowych katalizatorów palladowych i bimetalicznych Pd-Au dla procesu wytwarzania nadtlenku wodoru w reakcji bezpośredniej wodoru i tlenu. Badania te objęte są klauzulą tajności i wyniki nie mogą być udostępniane.

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

Prace dla Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN w Zabrze
(wykonawca: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Płytki krzemowe oraz szklane pokryte warstwami polimerów dostarczone przez Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN w Zabrze były badane metodą elipsometryczną za pomocą analizy wielokątowej (AOI) oraz spektroskopowej. 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 wyznaczenie wrażliwości polimerowych filmów termokurczliwych na zmiany temperatury.

Dostarczone płytki szklane i krzemowe oznaczone jako partia XV pokryte były warstwą kopolimeru etylenu i bezwodnika meteinowego (Et-MA), oraz warstwą Et-MA i termowrażliwą warstwą pochodnej poliglicydołu o stężeniach nanoszonego polimeru 2%, 5% i 8%. Płytki oznaczone jako PIPOx były to płytki szklane i krzemowe aminosililowane (APTES) z naniesioną warstwą termowrażliwej polioksazoliny. Badane były także płytki oznaczone jako ENOx3 - płytki z termowrażliwą warstwą polioksazoliny naniesioną na warstwę APTES.

Pomiary płytek wykonane były na mokro przy długości fali 658 nm. W celu wyznaczenia spęcznienia warstw termowrażliwych, płytki były moczone w wodzie w temp. 20°C przez 3 godz. do uzyskania maksymalnej grubości - pomiar co 30 min). Następnie dla zbadania reakcji warstw na zmiany temperatury próbki ogrzewano do 60°C, wykonując pomiar co 5°C.

Pomiary przeprowadzono również dla płytek krzemowych i szklanych hydroksylowanych (DSP) i następnie funkcjonalizowanych 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 badane warstwy termo wrażliwe pęcznią w wyniku moczenia ich w wodzie. Przyrost grubości warstw zależny był od stężenia roztworu wyjściowego polimeru, z którego następowało nakładanie na płytki. Im wyższe stężenie tym przyrost grubości był większy i dochodził do 50% grubości początkowej. W wyniku zmian temperaturowych następował wzrost grubości badanych warstw wraz ze wzrostem temperatury, a nie jak oczekiwano, ich kurczenie. Tylko dla warstw bezpośrednio polimeryzowanych na powierzchniach płytek (DSM) wraz ze wzrostem temperatury następowało kurczenie się warstw.

Uzyskane wyniki pokazały, że zsyntetyzowane polimery termokurczliwe zmieniają swoją grubość pod wpływem temperatury, czyli są termicznie aktywne. Jednakże należy zmodyfikować sposób nakładania ich na podłoża, gdyż wykazano, że tylko dla podłoży krzemowych, na których polimery były bezpośrednio polimeryzowane, zmniejszenie grubości warstw następowało w pożądanej temp. 35°C.

4. Węglowe ogniwa paliwowe z elektrolitem ze stopionych węglanów (DC-MCFC)

Prace dla PGE Polskiej Grupy Energetycznej w Warszawie
(kierownik projektu: dr inż. Grzegorz Mordarski)

Węglowe ogniwo paliwowe (DCFC) przekształca z wysoką sprawnością energię chemiczną zawartą w węglu bezpośrednio w energię elektryczną. Różnicą pomiędzy ogniwem paliwowym zasilanym wodorem a węglowym ogniwem paliwowym jest rodzaj dostarczanego paliwa. W węglowym ogniwie paliwowym jest to węgiel stały, który jako paliwo ma wiele zalet. Teoretyczna sprawność ogniw DCFC jest większa od 100 % za sprawą dodatniej zmiany entropii reakcji zachodzącej w ogniwie $C+O_2=CO_2$.

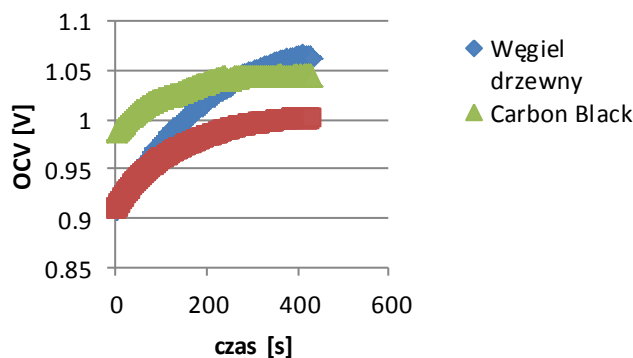
Węgiel w porównaniu do wodoru jest wygodniejszy w magazynowaniu i transporcie oraz stwarza mniejsze zagrożenie wybuchu. Prawie wszystkie materiały bogate w węgiel pierwiastkowy takie jak: węgle kopalne, gaz ziemny, ropa naftowa i biomasa łatwo mogą być przekształcone i oczyszczone na paliwo do DCFC.

Ze względu na rodzaj elektrolitu rozróżniamy kilka kategorii DCFC. Jedną z nich jest DCFC oparte na elektrolicie ze stopionych węglanów (DC-MCFC). Ten typ ogniwa paliwowego stał się obiektem naszych badań. Nasze wysiłki skierowane były na skonstruowaniu DCFC (Etap pierwszy "Rozruch") i ulepszaniu parametrów pracy ogniwa (Etap drugi "Testy wstępne").

Celem zadań przeprowadzonych w etapie pierwszym było sprawdzenie możliwości budowy wysokotemperaturowych ogniw paliwowych opartych na ciekłym elektrolicie węglanowym zasilanych węglem stałym. Cel został osiągnięty przez konstrukcję małogabarytowych ogniw, dla których było wybudowane stanowisko testowe. Działanie ogniwa zasilanego węglem pierwiastkowym zostało sprawdzone wstępnymi testami.



Rysunek 1. Instalacja ogniwa paliwowego.



Rysunek 2. Napięcie otwartego ogniwa zasilanego: węglem drzewnym, "Carbon Black" i grafitem

Optymalizując parametry ogniwa oraz jego stabilność, matrycę węglanowego ogniwa paliwowego wykonano kombinowaną metodą odlewania foliowego. Proszek $LiAlO_2$ zmieszany z węglanami posłużył jako materiał do wytworzenia stabilnych matryc. Takie matryce wykazały stabilność mikrostruktury podczas cyklicznych testów termicznych przeprowadzonych w atmosferze powietrza w temperaturze 923K.

Obecne prace skoncentrowane są na optymalizacji osiągniętych małogabarytowych ogniw paliwowych przez dobór: optymalnej temperatury pracy ogniwa, materiałów anodowych i katodowych, składu eutektyki węglanowej, składu i szybkości przepływu mieszaniny gazów anodowych i katodowych, katalizatorów, ilości i składu paliwa kompozytowego.

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2012

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

PRACE HABILITACYJNE

1. B. Jachimska "Konformacja polielektrolitów i białek w roztworach elektrolitów a topologia tworzonych warstw na powierzchniach modelowych", IKiFP PAN, Attyka, Kraków 2012 [ISBN 978-83-62139-37-8]

PRACE PRZEGLĄDOWE I ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Nattich-Rak, J. Barbasz, "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Mica"; in: "Proteins at Interfaces III State of the Art", ACS Books 2012, chapter 5, p.97-127, [ISBN 9780841227965]
2. W. Płaziński, A. Płazińska "Equilibrium and Kinetic Modeling of Adsorption at Solid/Solution Interfaces", in: "Application of Adsorbents for Water Pollution Control" (A. Bhatnagar, Ed.), Bentham Science Publishers 2012, p.32-80, [eISBN: 978-1-60805-269-1, ISBN: 978-1-60805-538-8]
3. M. Szaleniec "Biokatalityczne utlenianie węglowodorów alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych przez dehydrogenazę etylobenzenową", in: "Zastosowania metod statystycznych w badaniach naukowych IV" (J. Jakubowski, J. Wątroba, Eds.), Statsoft Polska, Kraków 2012, p.59-66 [ISBN 978-83-88724-64-0]
4. M. Wierzchoń, M. Orzechowski, J. Barbasz, "Interdyscyplinarność w naukach kognitywnych - science, fiction, czy science fiction?", in: "Interdyscyplinarnie o interdyscyplinarności" (A. Chmielewski, M. Dudzikowa, A. Grobler, Eds.), Impuls, Kraków 2012, p.113-130 [ISBN 978-83-7587-958-2]

ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O CYRKULACJI MIĘDZYNARODOWEJ

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 "Modeling Adsorption of Colloids and Proteins"; Current Opinion Colloid Interface Sci., 17 (2012) 173-186
- 3.
4. 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
5. Z. Adamczyk, B. Cichoński, M. Ekiel-Jeżewska, A. Słowińska, E. Wajnryb, M. Wasilewska "Fibrinogen Conformations and Charge in Electrolyte Solutions Derived from DLS and Dynamic ν Viscosity Measurements", J. Colloid Interface Surf., 385 (2012) 244-257
6. P. Batys, P. Weroński "Modeling of LbL multilayers with Controlled Thickness, Roughness, and Specific Surface Area", J. Chem. Phys., 137 (2012) 214706-1-10

7. U.Bazylińska, J.Pietkiewicz, J.Saczko, M.Nattich-Rak, J.Rossowska, A.Garbiec, K.A.Wilk "Nanoemulsion-templated Multilayer Nanocapsules for Cyanine-type Photosensitizer Delivery to Human Breast Carcinoma Cells"; *Eur. J. Pharmaceutical Sci.*, 47 (2012) 406-420
8. 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.*, 87 (2012) 147–153
9. 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*, 413 (2012) 266-272
10. T.Borowski, A.Wójcik, A.Mińczewska, V.Georgiev, M.R.A.Blomberg, P.E.M.Siegbahn "The Alkenyl Migration Mechanism by Extradiol Dioxygenases. A Hybrid DFT Study", *J. Biol. Inorg. Chem.*, 17 (2012) 881-890
11. Ł.Bratasz, I.Harris, Ł.Lasyk, M.Łukowski, R.Kozłowski "Future Climate-Induced Pressures on Painted Wood", *J. Cultural Heritage*, 13 (2012) 365-370
12. Ł.Bratasz, A.Kozłowska, R.Kozłowski "Analysis of Water Adsorption by Wood Using the Guggenheim-Andersen-de Boer Equation", *Eur. J. Wood Prod.*, 70 (2012) 445-451
13. E.Broclawik, D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj "Preface", *Struct. Chem.*, 23 (2012) 1291-1292
14. M.Cieśla, J.Barbasz, "An RSA Study of Dimers", *J. Stat. Mech.*, (2012) P03015
15. M.Cieśla, J.Barbasz, "Random Sequential Adsorption on Fractals ", *J. Chem. Phys.*, 137 (2012) 044706
16. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk "Human Serum Albumin Monolayers on Mica - electrokinetic characteristics" *Langmuir* 2012, 28 (44), 15663–15673
17. 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
18. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk, M.Kujda "Mechanisms of HSA Adsorption on Mica: Electrokinetic Studies", *FEBS Journal*, 279 (2012) 516
19. M.Dudek, M.Mosiąlek, G.Mordarski, R.P.Socha, A.Rapacz-Kmita "Ionic Conductivity of the CeO₂-Gd₂O₃-SrO System", *Archiv. Metallurgy Mater.*, 56 (2011) 1249-1255 - **nie uwzględnione w 2011**
20. M.Dudek, P.Tomczyk, K.L.Juda, R.Tomov, B.A.Głowacki, S.Batty, P.Risby, R.Socha "Comparison of the Performances of DCFC Fuelled with the Product of Methane RF Plasma Reforming and Carbon Black", *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7 (2012) 6704-6721

21. D.Duraczyńska, E.Serwicka, A.Drelinkiewicz, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, R.Socha, M.Zimowska, Z.Olejniczak "Nanospace Constrains in Mesoporous Silica Carriers – A Factor of Critical Importance in Promoting the Catalytic Activity of Supported Ruthenium(II) Complex with Hemilabile Phosphine Ligand", *Appl. Catal. A*; 427-428 (2012) 16-23
22. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic Degradation of Organic Compounds Enhanced by Chemical Oxidants", *Elektronika*, (6) (2012) 115-117
23. 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.*, 44 (2011) 495001 - **nie uwzględnione w 2011**
24. R.Fraćkowiak, G.Para, P.Warszyński, K.A.Wilk "New Environmentally Friendly Dicarboxylic Amine Dichlorides; Nonequivalent Adsorption and Interactions with Model Polyelectrolyte", *Colloids Surf. A*, 413 (2012) 108-114
25. M.Grzesiak, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Investigations of New Barium Dicarboxylates", *Zeit. Kristallogr.*, 227 (2012) 629-634
26. M.Grzesik; A.Ptaszek, J.Skrzypek, M.Derewiński "Kinetics of Methanol Dehydration to Dimethyl Ether over Zeolite H-ZSM-5 Catalyst", *Przem. Chem.*, 91 (2012) 1388-1392
27. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Ruszel, R. Grabowski, L. Kepiński, M. A. Małecka "Au/MCr₂O₄ (M=Co, Mn, Fe) Catalysts in the Oxidations of CO, C₂ and C₃ Hydrocarbons" *React. Kinet. Mech. Catal.*, 105 (2012) 69-78
28. J.Gurgul, E.Młyńczak, N.Spiridis, J.Korecki "Layer-by-Layer Epitaxial Growth of Polar FeO(111) Thin Film on MgO(111)", *Surf. Sci.*, 606 (2012) 711-714
29. 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
30. B.Jachimska, A.Kozłowska, A.Pajor-Świerzy "Protonation of Lysozymes and Its Consequences for the Adsorption onto a Mica Surface", *Langmuir*, 28 (2012)11502-11510
31. B.Jachimska, A.Pajor "Physico-chemical Characterization of Bovine Serum Albumin in Solution and as Deposited on Surfaces", *Bioelectrochem.*, 87 (2012) 136-146
32. J.Janas, W.Rojek, S.Dźwigaj "The influence of C₁ and C₂ Organic Reducing Agents on Catalytic Properties of Co(II)-single Site BEA Zeolite in SCR of NO", *Catal. Today*, 191 (2012) 32-37
33. J.Janas, W.Rojek, T.Shishido, S.Dźwigaj "Selective Catalytic Reduction of NO on Single Site FeSiBEA Zeolite Catalyst: Influence of C₁ and C₂ Reducing Agents on the Catalytic Activity", *Appl. Catal. B*, 123-124 (2012) 134-140

34. D.Knack, C.Hagel, M.Szaleniec, A.Dudzik, A.Salwiński, J.Heider, "Substrate and Inhibitor Spectrum of Ethylbenzene Dehydrogenase: Perspectives on Application Potential and Catalytic Mechanism", *Appl. Environ. Microbiol.*, 78 (2012) 6475–6482
35. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "The Effect of Support Properties in the Preparation of Pd Size-controlled Catalysts by 'Water-in-Oil' Microemulsion Method", *Catal. Commun.*, 22 (2012) 58–67
36. P.Kozyra, M.Radoń, J.Datka, E.Broclawik "On the Nature of Spin- and Orbital-resolved Cu⁺-NO Charge Transfer in the Gas Phase and at Cu(I) Sites in Zeolites", *Struct. Chem.*, 23 (2012) 1349-1356
37. M.Krzak, Z.Tabor, P.Nowak, P.Warszyński, A.Karatzas, I.A.Kartsonakis, G.C.Kordas "Water Diffusion in Polymer Coatings Containing Water-trapping Particles. Part 2. Experimental Verification of the Mathematical model", *Progress Organic Coatings*, 75 (2012) 207-214
38. M.Krzan, K.Małyśa "Influence of Electrolyte Presence on Bubble Motion in Solutions of Sodium n-Alkylsulfates (C8, C10, C12)", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 48 (2012) 49-62
39. L.Krzemień, M.Łukomski "Algorithm for Automated Analysis of Surface Vibrations Using Time-averaged Digital Speckle Pattern Interferometry", *Appl. Optics*, 51 (2012) 5154-5160
40. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Warsińska, G.Jagura-Burdzy, M.Adamczyk "KfrA Protein of R751 Plasmid Study by DLS, Microelectrophoresis and AFM Methods", *FEBS Journal*, 279 (2012) 516
41. Ł.Lasyk, M.Łukomski, T.M.Olstad, A.Haugen "Digital Speckle Pattern Interferometry for the Condition Surveys of Painted Wood: Monitoring the Altarpiece in the Church in Hedalen, Norway", *J. Cultural Heritage*, 13S, (2012) 102-108
42. J.Li, 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*, 50 (2012) 1625-1634
43. M.Łukomski "Painted Wood. What Makes the Paint Crack?", *J. Cultural Heritage* 13S (2012) 90-93
44. L.Matachowski, M.Zimowska, D.Mucha, T.Machej "Ecofriendly Production of Ethylene by Dehydration of Ethanol over Ag₃PW₁₂O₄₀ Salt in Nitrogen and Air Atmospheres", *Appl. Catal., B.* 123 (2012) 448-456
45. A.Micek-Ilnicka, E.Bielańska, L.Lityńska-Dobrzyńska, A.Bielański "Carbon Nanotubes, Silica and Titania Supported Heteropolyacid H₃PW₁₂O₄₀ as the Catalyst for Ethanol Conversion", *Appl. Catal. A*, 421-422 (2012) 91-98
46. A.Micek-Ilnicka, B.Gil "Heteropolyacid Encapsulation into the MOF: Influence of Acid Particles Distribution on Ethanol Conversion in Hybrid Nanomaterials", *Dalton Trans.*, 41 (2012) 12624-12629

47. J.Mizera, N.Spiridis, R.P.Socha, M.Zimowska, R.Grabowski, K.Samson, J.Korecki "The Influence of Base Metal (M) Oxidation State in Au-M-O/TiO₂ Systems on Their Catalytic Activity in Carbon Monoxide Oxidation", *ACS Catal.*, 2 (2012) 38-55
48. J.Mizera, N.Spiridis, R.Socha, R.Grabowski, K.Samson, J.Korecki, B.Grzybowska, J.Gurgul, L.Kepiński, M.A.Malecka "Au/FeOx Catalysts of Different Degree of Iron Oxide Reduction", *Catal. Today*, 187 (2012) 20-29
49. M.Morga, Z.Adamczyk, K.Jaszczółt, M.Nattich-Rak, G.Para "Colloid Zirconia Binder of Improved Wetting Properties", *Ceramiks Sylikaty*, 56 (2012) 1-8
50. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica Electrokinetic Characteristics", *J. Colloid Interface Sci.*, 386 (2012) 121-128
51. M.Mosiąlek, E.Bielańska, RP.Socha, M.Dudek, G.Mordarski, P.Nowak, J.Barbasz, A.Rapacz-Kmita, "Changes in the Morphology and the Composition of the Ag| YSZ and Ag| LSM Interfaces Caused by Polarization", *Solid State Ionics*, 225 (2012) 755-759
52. M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Sadowska, M.Morga, M.Oćwieja "Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica: Characterization by Colloid Deposition"; *Colloids Surf. A*, 412 (2012) 72-81
53. 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*, 116 (2012) 3071-3078
54. M.Nosek, P.Weroński, P.Nowak, J.Barbasz "Voltammetric Studies of Colloidal Particle Monolayer on a Gold Rotating Disk Electrode", *Colloids Surf. A*, 403 (2012) 62-68
55. P.Nowak, R. P.Socha, T.Cieślík "Influence of Adsorption on the Charge Transfer Reactions at the Pyrite Surface. Preliminary Study", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 48 (2012) 19-28
56. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, K.Kubiak "Tuning Properties of Silver Particle Monolayers via Controlled Adsorption-Desorption Processes", *J. Colloid Interface Sci.*, 376, (2012) 1-11
57. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga, E.Bielańska, A.Węgrzynowicz "Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica Preparation by Controlled Self-assembly", *J. Colloid Interface Sci.*, 386 (2012) 51-59
58. M.Oszajca, L.Smrcok, H.Palkova, W.Łasocha "Synthesis and Structure Determination of tetrakis(4-Iodoanilinum) beta-Octamolybdate Dihydrate", *J. Mol. Struct.*, 1021 (2012) 70-75
59. A.Pacuła, K.Ikeda, T.Masuda, K.Uosaki "Examination of the Electroactive Composites Containing Cobalt Nanoclusters and Nitrogen-doped Nanostructured Carbon as Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction", *J. Power Sources*, 220 (2012) 20-30
60. T.Pańczyk, M.Drach, P.Szabelski, A.Jagusiak "Magnetic Anisotropy Effects on the Behavior of a Carbon Nanotube Functionalized by Magnetic Nanoparticles Under External Magnetic Fields", *J. Phys. Chem. C*, 116 (2012) 26091-26101

61. T.Pańczyk, W.Rudziński, A.Jagusiak "Adsorption of Colloid Nanoparticles on Carbon Nanotubes Studied by Means of Molecular Dynamics Simulations", *Colloids Surf. A*, 409 (2012) 149-158
62. T.Pańczyk, P.Szabelski, M.Drach "Implicit Solvent Model for Effective Molecular Dynamics Simulations of Systems Composed of Colloid Nanoparticles and Carbon Nanotubes", *J. Colloid Interface Sci.*, 383 (2012) 55-62
63. W.Płaziński "Sorption of Metal Cations by Alginate-based Biosorbents. On the Correct Determination of the Thermodynamic Parameters", *J. Colloid Interface Sci.*, 368 (2012) 547-551
64. W.Płaziński "Conformational Properties of Acidic Oligo- and Disaccharides and Their Ability to Bind Calcium: A Molecular Modeling Study", *Carbohydrates Res.* 357 (2012) 111-117
65. W.Płaziński "Sorption of Lead, Copper, and Cadmium by Calcium Alginate. Metal Binding Stoichiometry and the pH Effect", *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 19 (2012) 3516-3524
66. W.Płaziński, M.Drach "The Dynamics of the Calcium-Induced Chain-Chain Association in the Polyuronate Systems", *J. Comp. Chem.*, 33 (2012) 1709-1715
67. W.Płaziński, M.Drach "Thermodynamic Aspects of Calcium Binding by poly(α -L-Guluronate) Chains. A Molecular Simulation Study", *Appl. Surf. Sci.*, 262 (2012) 153-155
68. W.Płaziński, A.Knyś-Dzieciuch "Interactions between CD44 Protein and Hyaluronan: Insights from the Computational Study", *Mol. Biosys.*, 8 (2012) 543-547
69. 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", *Struct. Chem.*, 23 (2012) 1409-1415
70. R.Rachwałik, M.Hunger, B.Sulikowski "Transformations of Monoterpene Hydrocarbons on Ferrierite Type Zeolites", *Appl. Catal. A*, 427-428 (2012) 98-105
71. B.Rachwał, Ł.Bratasz, M.Łukomski, R.Kozłowski "Response of Wood Supports in Panel Paintings Subjected to Changing Climate Conditions", *Strain*, 48 (2012) 366-374
72. B.Rachwał, Ł.Bratasz, L.Krzemień, M.Łukomski, R.Kozłowski "Fatigue Damage of the Gesso Layer in Panel Paintings Subjected to Changing Climate Conditions", *Strain*, 48 (2012) 474-481
73. P.Romańczyk, E.Broclawik "Zastosowanie teorii funkcjonałów gęstości do modelowania właściwości elektronowych skorpionianowych kompleksów oksodimolibdenowych", *Chemik*, 65, (2011) 1093-1100 - nie uwzględnione w 2011
74. D.Rutkowska-Żbik, R.Gryboś, R.Tokarz-Sobieraj "DFT Investigation of Molybdenum (Oxo)carbide Formation from MoO_3 ", *Struct. Chem.*, 23 (2012) 1417-1424

75. D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "How Many Ligands Can Be Bound by Magnesium-Porphyrin - A Symmetry-Adapted Perturbation Theory Study", *J. Chem. Theory Comput.*, 8 (2012) 2972-2982
76. K.Stawicka, I.Sobczak, M.Trejda, B.Sulikowski, M.Ziółek "Organosilanes Affecting the Structure and Formation of Mesoporous Cellular Foams" *Microporous Mesoporous Mater.* 155 (2012) 143-152
77. M.Stepnik, J.Arkusz, A.Smok-Pieniążek, A.Brątek-Skicki, A.Salvati, I.Lynch, K.A.Dawson, J.Gromadzińska, W.H.De Jong, K.Rydziński "Cytotoxic Effects in 3T3-L1 Mouse and WI-38 Human Fibroblasts Following 72 Hour and 7Day Exposures to Commercial Silica Nanoparticles", *Toxicology Applied Pharmacology*, 263 (2012) 89-101
78. W.Simka, M.Mosiąlek, G.Nawrat, P.Nowak, J.Żak, J.Szade, A.Winiarski, A.Maciej, L.Szyk-Warszyńska "Electrochemical Polishing of Ti-13Nb-13Zr Alloy", *Surface Coatings Technol.*, 213 (2012) 239-246
79. N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, K.Freindl, B.Figarska, T.Giela, E.Młyńczak, B.Strzelczyk, M.Zajac, J.Korecki "Growth and Electronic and Magnetic Structure of Iron Oxide Films on Pt(111)", *Phys. Rev. B*, 85 (2012) 075436
80. Z.Starowicz, M.Lipiński, K.Berent, R.Socha, K.Szczepanowicz, T.Kruk "Antireflection TiO₂ Coating with Plasmonic Metal Nanoparticles for Silicon Solar Cells", *Plasmonics*, (2012) DOI:10.1007/s11468-012-9412-y [eISSN: 1557-1955, ISSN 1557-1963]
81. M.Szaleniec "Prediction of Enzyme Activity with Neural Network Models Based on Electronic and Geometrical Features of Substrates", *Pharm. Reports*, 64 (2012) 511-531
82. M.Szaleniec, A.Salwiński, T.Borowski, J.Heider, M.Witko "Quantum Chemical Modeling Studies of Ethylbenzene Dehydrogenase Activity", *Int. J. Quantum Chem.*, 112 (2012) 1990-1999
83. K.Szczepanowicz, G.Para, A.M.Bouzga, C.Simon, J.Yang, P.Warszyński "Hydrolysis of Silica Sources: APS and DTSACI in Microencapsulation Process", *Physicochem. Probl. Miner. Process.*, 48 (2012) 403-412
84. Z.Tabor, M.Krzak, P.Nowak, P.Warszyński "Water Diffusion in Polymer Coatings Containing Water-trapping Particles. Part 1. Finite Difference-based Simulations", *Progress Organic Coatings*, 75 (2012) 200-206
85. T.Urbańczyk, M.Strojecki, M.Krośnicki, J.Koperski "Entangled Cadmium Atoms - From the Method of Production to the Test of Bell Inequalities", *Optica Applicata*, 42 (2012) 433-441
86. K.A.Wilk, R.Fraćkowiak, J.Łuczyński, P.Warszyński "Cleavable Gemini Cationic Surfactants: Experimental and Theoretical Description of Adsorption", *Chem. Lett.*, 41 (2012) 1096-1098
87. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Mechanism of Benzylic Hydroxylation by 4-Hydroxymandelate Synthase. A Computational Study", *Biochem.*, 51 (2012) 9570-9580

88. W.Zawadzki, M.Bartosik, K.Dzierzega, Ł.Bratasz, M.Łukomski, E.Peacock "Application of Fiber Bragg Gratings for Strain Measurement in Historic Textiles and Paintings on Canvas", *Optica Applicata*, 42 (2012) 503-517
89. J.Zawała, T.Dąbroś, H.A.Hamza "Settling Properties of Aggregates in Paraffinic Bitumen Froth Treatment", *Energy Fuels*, 26 (2012) 5775-5781

Artykuły ogłoszone z rokiem wydania 2013

1. Z.Adamczyk, M.Kujda, M.Nattich-Rak, M.Warsińska, G.Jagura-Burdzy, M.Adamczyk "Revealing Properties of the KfrA Plasmid Protein via Combined DLS, AFM and Electrokinetic Measurements", *Colloids Surf.* 103 (2013) 635-641
2. A.Bratak-Skicki, P.Żeliszewska, Z.Adamczyk "Tuning Conformations of Fibrinogen Monolayers on Latex Particles by pH of Adsorption", *Colloids Surf. B*, 103 (2013) 482-488.
3. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk, M.Kujda "Mechanism of HSA Adsorption on Mica Determined by Streaming Potential, AFM and XPS Measurements", *Colloids Surf. B*, 101 (2013) 442-449
4. J.Gurgul, K.Łątka, I.Hnat, J.Rynkowski, S.Dźwigaj "Identification of Iron Species in FeSiBEA by DR UV-vis, XPS and Mössbauer Spectroscopy: Influence of the Fe Content", *Microporous Mesoporous Mater.*, 168 (2013) 1-6
5. M.Lundberg, T.Borowski "Oxoferryl Species in Mononuclear Non-heme Iron Enzymes: Biosynthesis, Properties and Reactivity from a Theoretical Perspective", *Coord. Chem. Rev.*, 257 (2013) 277-289
6. L.Matachowski, A.Drelinkiewicz, R.Rachwalik, M.Zimowska, D.Mucha, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Preparation and Characterization of Mesoporous Cs₂HPW₁₂O₄₀ Aalt, Active in Transformation of m-Xylene", *Appl. Catal. A*, 450C (2013) 19-27
7. A.Rapacz-Kmita, E.Stodolak-Zych, M.Dudek, B.Szaraniec, A.Różycka, M.Mosiąlek, L.Mandecka-Kamień "Degradation of Nanoclay-filled Polylactide Composites", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 49 (2013) 91-99

Artykuły ogłoszone elektronicznie

1. M.Adamczak, G.Para, C.Simon, P.Warszyński "Natural Oil Nanoemulsions as Cores for Layer-by-Layer Encapsulation", *J. Microencapsulation*, DOI: 10.3109/02652048.2012.752536
2. Ł.Bratasz "Allowable Microclimatic Variations for Painted Wood", *Stud. Conservation*, DOI:10.1179/2047058412Y.0000000061
3. A.Bratak-Skicki, P.Dąbrowska, Z.Adamczyk "Tuning conformations of Fibrinogen Monolayers on Latex Particles by pH of Adsorption", *Colloids Surf. B*, DOI: 10.1016/j.colsurfb.2012.11.005

4. M.Elzbieciak-Wodka, P.Warszyński "Effect of Deposition Conditions on Thickness and Permeability of the Multilayer Films Formed from Natural Polyelectrolytes", *Electrochim. Acta*, DOI:10.1016/j.electacta.2012.10.169
5. U.Filek, D.Mucha, M.Hunger, B.Sulikowski "Novel Gallium and Indium Salts of the 12-Tungstophosphoric Acid: Synthesis, Characterization and Catalytic Properties", *Catal. Commun.*, DOI:10.1016/j.catcom.2012.10.012
6. J.Gurgul, M.T.Rinke, I.Schellenberg, H.Eckert, R.Pöttgen "The Antimonide Oxides *REZnSbO* and *REMnSbO* (*RE*=Ce, Pr) - An XPS Study", *Solid State Sci.*, DOI:10.1016/j.solidstatesciences.2012.11.014
7. B.Jachimska, M.Łapczyńska, S.Zapotoczny "Reversible Swelling Process of 6th Generation Poly(amidoamine) (PAMAM) Dendrimers Molecule as Determined by Quartz Crystal Microbalance (QCM) Technique", *J. Phys. Chem. C*, DOI:10.1021/jp307832p
8. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of n-Octanol on the Bubble Impact Velocity, Bouncing and the Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Solid Surfaces", *Colloids Surf. A*, DOI:10.1016/j.colsurfa.2012.10.025
9. D.Kosior, J.Zawała, M.Krasowska, K.Małyśa "Influence of Surface Active Substances on Kinetics of the Bubble Attachment to Hydrophobic Surfaces", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, DOI:10.1039/C2CP43545D
10. A.Miłaszewska, E.Broclawik, T.Borowski "On the Catalytic Mechanism of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase (HppE). A Hybrid DFT Study", *Chem. European J.*, DOI:10.1002/chem.201202825
11. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, E.Bieleńska "Preparation and Characterization of the Electroactive Composites Containing Nickel Nanoparticles and Carbon Nanotubes", *Electrochim. Acta*, DOI: 10.1016/j.electacta.2012.12.062
12. A.Pacuła, R.P.Socha, M.Zimowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, P.Nowak "Application of As-Synthesized Co-Al Layered Double Hydroxides for the Preparation of the Electroactive Composites Containing N-doped Carbon Nanotubes", *Appl. Clay Sci.*, DOI: 10.1016/j.clay.2012.11.007
13. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, L.Fiedor "Ligation of Water to Magnesium Chelates of Biological Importance", *J. Mol. Model.*, DOI:10.1007/s00894-012-1459-3
14. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Metallobacteriochlorophylls as Potential Dual Agents for Photodynamic Therapy and Chemotherapy", *J. Mol. Model.*, DOI:10.1007/s00894-012-1747-y
15. W.Simka, M.Sowa, R.P.Socha, A.Maciej, J.Michalska "Anodic Oxidation of Zirconium in Silicate Solutions", *Electrochim. Acta*, DOI: 10.1016/j.electacta.2012.10.130

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

1. A.Bielański "100 lat w Krakowie - wspomnienia", A.Bielański, Kraków 2012, pp.68
2. E.Broclawik "Profesor Adam Bielański - Profesor profesorów, Mistrz i Nauczyciel", PAUza Akademińska, Tygodnik PAU, 188 (2012) 3 [ISSN 1689-488X]
3. E.Broclawik "Profesor Adam Bielański - Profesor profesorów, Mistrz i Nauczyciel", Niedziałki, (4) (2012) [ISSN 1425-8994]
4. E.Broclawik, A.M.Kobos "Drogi do zrozumienia mechanizmów katalizy", in: "Po drogach uczonych" (A.M.Kobos, Ed.), Wydawnictwo PAU Kraków 2012, vol.5, p.55-77 [ISBN 978-83-7676-127-5]
5. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, R.Socha, M.Zimowska, Z.Olejniczak "Architecture of a Mesoporous Support - A Key Factor Controlling Catalytic Activity of Supported Ruthenium (II) Complex", Annual Report 2012, Polish Academy of Sciences, p.62-64 [ISSN 1640-3754]
6. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak, M.Oszajca, W.Łasocha "Rentgenowska dyfraktometria proszkowa w badaniach zabytkowych obiektów. Nowe możliwości badawcze na Wydziale Chemii UJ", Zeszyty Naukowe UJ MCCCXX (Opuscula Musealia) 19 (2011) 25-36 [ISSN 0239-9989] - **opublikowano w 2012**
7. M.Szaleniec "Alchemia szkockiej ambrozji", Charaktery - magazyn psychologiczny, 09 (2012) 92-111
8. M.Szaleniec "Chemia chleba", Charaktery - magazyn psychologiczny, 05 (2012) 94-109

ARTYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. P.Nowak, A.Węgrzynowicz, K.Jakubiec, T.Chmielewski "Pyrite Oxidation and Inhibition by Certain Chemicals in Relation to the Problem of Acidity Generation in Acid Sulfate Soils", in: "Geological Survey of Finland Guide 56 (2012) (Proc. 7th Int. Acid Sulfate Soil Conf.)", Geological Survey of Finland, Espoo 2012, p.77-79 [ISBN 978-952-217-206-6, ISSN 0781-4240]
2. W.Płaziński "Interactions of Metal Ions with Alginates: the Use of Computer Simulations to Recover the Macroscopic Experimental Data", Proc. PSRC Int. Conf. Chemical, Ecology and Environmental Sciences 2012 (A.Chin-Cheng Chang, P.S.Sandhu, Eds.), Planetary Science Research Centre 2012, p.146-148 [ISBN: 978-81-922428-6-6]
3. P.Stén, S.Engblom, S.Heikkilä, T.Andersson, P.Nowak "Column Leaching Experiments on Acid Sulfate Soils from the Risöfladan Experimental Field (Vasa, Finland)", in: "Geological Survey of Finland Guide 56 (2012) (Proc. 7th Int. Acid Sulfate Soil Conf.)", Geological Survey of Finland, Espoo 2012, p.122-125 ISBN 978-952-217-206-6, ISSN 0781-4240]

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. M.Adamczak, G.Para, C.Simon, P.Warszyński "Natural Oil Nanoemulsions as Cores for Layer-by-Layer Encapsulation", Book of Abstracts. Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
2. M.Adamczak, G.Para, C.Simon, P.Warszyński "Layer-by-Layer Encapsulation of Natural Oil Emulsion Droplets", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.125 [ISBN 978-83-60514-16-0]
3. K. Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, T.Machej, J.Matusik, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka, E.Wisła-Walsh, W.Włodarczyk "Pillared Montmorillonites as Catalysts for Removal of Chlorinated Volatile Organic Compounds from Air. Structural Characterization", Book of Abstracts. 6th Mid-European Clay Conf. MECC'12, Prague 2012 p.112 [ISSN 1802-2480, ISSN 1802-2499]
4. K.Balin, A.Nowak, J.Szade, M.Wojtyniak, J.Korecki, M.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Gieła, Ch.Quitmann, J.Raabe, Z.Celinski "Nanostructures in MBE Grown {Eu-Fe} Films", Final Program and Book of Abstracts. 8th European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS Europe 2012, Münster 2012, p.115
5. J.Barbasz, M.Cieśla, A.Michna "Adsorption on Fractal Collectors", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.82 [ISBN 978-83-60514-17-7]
6. P.Batys, P.Weroński "Numerical Studies of Self-assembled Multilayers", Book of Abstracts. 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012, p.16
7. P.Batys, P.Weroński "Model Surfaces of Controlled Roughness", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.86 [ISBN 978-83-60514-17-7]
8. P.Batys, P.Weroński "Computer Modeling Layer-by-Layer Catalysts", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.129 [ISBN 978-83-60514-15-3]
9. Ł.Bratasz "Allowable Microclimatic Variations in Museums and Historic Buildings", Proc. Conf. Climate for Collections: Standards and Uncertainties, Munchen 2012
10. E.Broclawik, P.Kozyra, M.Mitoraj, J.Datka "Multiple Bond Activation by Coinage Metal Cations in Zeolites: Quantitative Charge Transfer Resolution", Book of Abstracts. 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012, p.106
11. M.Derewiński, P.Sarv "1H, 27Al and 31P MAS NMR Study of Phosphorous Modified HZSM-5 Zeolite", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.148 [ISBN 978-83-60514-15-3]

12. A.Drelinkiewicz, Ż.Kalemba, E.Lalik, E.Bielańska "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów polimerowych bazujących na solach polianiliny", *Chemik* (7) (2012) 189 [ISBN 0009-2886]
13. A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, E. Bielańska "Synteza nośnikowych katalizatorów palladowych metodą mikroemulsji water-in-oil. Wpływ właściwości nośników", *Chemik* (7) (2012) 218 [ISBN 0009-2886]
14. A.Drzewiecka-Matuszek, A.Dudzik, M.Tataruch, M.Szaleniec, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Alternatywny mechanizm reakcji utleniania alkilowych fenoli i anilin przez dehydrogenazę etylobenzenową", *Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012*, p.316
15. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Oszajca, A.Franke, M.Brindell, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik, "The Influence of N-Methylimidazole as Axial Ligand in the Water-soluble Iron(III) Porphyrin on the Formation of Fe(IV)-Oxo Species. A cCombined Experimental and Theoretical Study", *Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012*, p.130 [ISBN 978-83-60514-15-3]
16. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, A.A.Umińska, M.Witko "Mechanizm katalitycznego i niekatalitycznego utleniania cykloheksenu - Badania metodą DFT", *Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012*, p.310
17. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Szaleniec, T.Borowski, D.Knack, M.Witko, J.Heider "Prediction of Enzyme Activity with Quantum Chemical Modeling. Case Study of Ethylbenzene Dehydrogenase Reactivity", *Book of Abstracts. 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012*, p.149-150
18. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Szaleniec, P.Hejduk, M.Witko "DFT Modeling of Ammonia Adsorption on Low Index V₂O₅ Surfaces", *Book of Abstracts. 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012*, p.151-152
19. M.Dudek, A.Rapacz-Kmita, R.P.Socha, M.Mosiąlekm, M.Gajek "Utilization of Carbide Vanadium Particles in Fuel Cell Technology", *Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012*, p.151 [ISBN 978-83-60514-17-7]
20. A.Dudzik, M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider, P.Borowiecki "Enantioselective Reduction of Carbonyl Compounds by (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", *Book of Abstracts. 6th Int. Congr. Biocatalysis BIOCAT 2012, Hamburg 2012*, p.109 [ISBN 978-41492-50-9]
21. A.Dudzik, M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider, P.Borowiecki "(S)-Phenylethanol Dehydrogenase as a Catalyst in Prochiral Ketones and β-keto Esters Reduction", *Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012*, p.9 [ISBN 978-83-60514-15-3]
22. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.Bielańska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Wpływ składu chemicznego mieszanek tlenków otrzymanych z prekursorów typu hydrotalkitu M(II)_{4-x-y}Mn₄AlZr_xCe_yCO₃ (M(II)=Cu, Co; x=0;0,5; y=0;0,1) na aktywność w reakcji całkowitego spalania toluenu", *Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012*, p.50 [ISBN 978-83-60514-15-3]

23. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.Bielańska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-derived Cu-Mn-Al and Co-Mn-Al Mixed Oxide Catalysts for Total Oxidation of Toluene: the Role of Ce and Zr Additives", Book of Abstracts. 6th Mid-European Clay Conf. MECC'12, Prague 2012 p.130 [ISSN 1802-2480, ISSN 1802-2499]
24. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, R.Socha, M.Zimowska, Z.Olejniczak "Ograniczenia nanoprzestrzenne w kanałach mezoporowatego nośnika jako czynnik warunkujący aktywność katalityczną organometalicznego centrum aktywnego", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.193 [ISBN 978-83-60514-15-3]
25. J.Dziedzic, K.Szczepanowicz, P.Nowak, P.Warszyński "Synergistic Effect of the Oxidant and TiO₂ Photocatalyst in the Process of Humic Substances Removal from Water", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.51 [ISBN 978-83-60514-15-3]
26. J. Dziedzic, P. Nowak, P. Warszyński "Photocatalytic Degradation of the Organic Contaminants Enhanced by Oxidant", Book of Abstracts. 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012, p.27
27. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "How Dealumination Affects Physico-chemical Properties of Natural Clinoptilolite", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.151 [ISBN 978-83-60514-15-3]
28. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Transformations of alpha-Pinene over Dealuminated Natural Clinoptilolite", Book of Abstracts. 19th Zeolite Forum, Małe Ciche, Kraków 2012, p.17-18 [ISBN 978-83-92-9430-7-5]
29. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Właściwości katalityczne modyfikowanego, naturalnego klinoptylolitu", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.137 [ISBN 978-83-62139-47-7]
30. M.Elżbieciak-Wodka, P.Nowak, P. Warszyński "Resistance, Stability and Relaxation Time of Model Multilayer Films Depending on the Ionic Strength", Book of Abstracts, 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012, paper P5-6
31. B.Figarska, E.Madej, N.Spiridis, R.P.Socha, J.Korecki "Badania struktury i stanów elektronowych epitaksjalnych warstw tlenku manganu (II) na W(100)", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.195 [ISBN 978-83-60514-15-3]
32. B.Figarska, E.Madej, N.Spiridis, R.P.Socha, J.Korecki "The Studies of Structure and Electronic States of Epitaxial Manganese (II) Oxide on W(100)", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.166 [ISBN 978-83-60514-17-7]

33. U.Filek, A.Lubańska, B.Sulikowski "In situ Infrared Studies of the Thermal Decomposition of 12-Molybdophosphoric Heteropolycompounds", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.226 [ISBN 978-83-60514-15-3]
34. U.Filek, R.P.Socha, E.Bielańska, A.Bielański "Pd/H₆P₂W₁₈O₆₂ as the Bifunctional Catalyst for Ethanol Conversion", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.52 [ISBN 978-83-60514-15-3]
35. U.Filek, R.P. Socha, E.Bielańska, A.Bielański " Pd/H₆P₂W₁₈O₆₂ jako katalizator bifunkcyjny konwersji alkoholu etylowego", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.131 [ISBN 978-83-62139-47-7]
36. K.Freindl, M.Zajac, E.Partyka-Jankowska, W.Karaś, N.Spiridis, M.Ślęzak, T.Ślęzak, J.Korecki "Oxygen Adsorption on Fe Monolayer on W(110)", Book of Abstracts. 16th Int. Conf. Solid Films and Surfaces, Genoa 2012, paper WedA-POW.4
37. M.Gackowski, E.Bielańska, M.Derewiński "Osadzanie nanocząstek zeolitu typu MFI w makroporach monolitów krzemionkowych", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.78 [ISBN 978-83-62139-47-7]
38. T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, J.Korecki "LEEM - powierzchniowa mikroskopia elektronowa", Mater. 7. Seminarium 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2012', Zakopane 2012
39. B.Gil, B.Marszałek, A.Micek-Ilnicka, N.Reimer, N.Stock "Post-synthetic Modification of Coordination Networks", Proc. 44th Symp. on Catalysis, Prague 2012, p.OP26
40. B.Gil, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Heteropolyacid Encapsulated in MOF Materials as Effective Ethanol Conversion Catalysts", Proc. 6th Int. Workshop Characterization of Porous Materials: from Angstroms to Millimeters, Delray Beach 2012, p.94
41. M.Góral, R.Kosydar, A.Król, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Selektywne uwodornianie 2-butyn-1,4-diolu w obecności katalizatorów Pd/poli(4-winylopirydyna)", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.55 [ISBN 978-83-60514-15-3]
42. M.Grzesiak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania strukturalne związków strontu z kwasami dikarboksylowymi", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.156 [ISBN 978-83-60514-15-3]
43. J.Gurgul, M.Szczepanik-Ciba, R.Socha, E.Madej, J.Przewoźnik, B.Figarska, N.Spiridis, J.Korecki "Electronic and Magnetic Properties of the Fe/MnO(100) Interface", Book of Abstracts. 16th Int. Conf. Solid Films and Surfaces, Genoa 2012, paper WedA-POW.18
44. B.Jachimska, A.Kozłowska "Protonation of Lysozyme and Its Consequences for the Adsorption onto a Mica Surface", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.101 [ISBN 978-83-60514-17-7]

45. B.Jachimska, A.Kozłowska "Behavior of Hyperbranched Polyethylene Imine (PEI) Investigated by the Quartz Crystal Microbalance (QCM) and Atomic Force Microscope (AFM) Measurements", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.99 [ISBN 978-83-60514-17-7]
46. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Adsorption of Bovine Serum Albumin (BSA) on Silica Surface Investigated by the Quartz Crystal Microbalance (QCM) and Contact Angle Measurements", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.98 [ISBN 978-83-60514-17-7]
47. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Structure of Adsorbed 6th Generation Poly(amidoamine) PAMAM Dendrimers Investigated by the Quartz Crystal Microbalance (QCM)", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.100 [ISBN 978-83-60514-17-7]
48. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Wyznaczanie struktury 6-tej generacji dendrymerów poliamido-aminowych (PAMAM) za pomocą mikrowagi kwarcowej", Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, paper S10P47
49. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Badanie kinetyki adsorpcji surowiczej albuminy wołowej (BSA) na modelowej powierzchni krzemu z zastosowaniem mikrowagi kwarcowej oraz pomiarów kąta zwilżania", Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, paper S03P49
50. A.Jamrozik, J.Przewoźnik, M.Mazurkiewicz, A.Małolepszy, L.Stobiński, K.Matlak, J.Korecki, K.J.Kurzydłowski, K.Burda, "Investigation of Functionalized Multi-wall Carbon Nanotubes Properties", Abstracts Book, Int. Conf. Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials NANOSMAT, Prague 2012
51. K.Jamróży, M.Nattich-Rak, D.Dronka-Góra, M.Góra, M.K.Łuczyński, E.Bielańska "Wpływ soli nieorganicznych i surfaktantów na degradację celulozy w warunkach hydrotermalnych", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.197 [ISBN 978-83-60514-15-3]
52. E.Jamróż, G.Para, B.Jachimska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A.Para "Albumin-Furcellarane Complexes as Cores for Nanoencapsulation", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.49 [ISBN 978-83-60514-16-0]
53. E.Jamróż, K.Szczepanowicz, G.Para, B.Jachimska, P.Warszyński, A.Para "Furcelleran-Albumine Complex Formation", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.89 [ISBN 978-83-60514-16-0]
54. E.Jamróż, K.Szczepanowicz, G.Para, B.Jachimska, P.Warszyński, A.Para, "Protein-Furcellarane Complexes for Nanocapsule Formation", Poster Presentations, 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012, p.219

55. E.Jarek, M.Krzan, L.Szyk-Warszyńska, M.Orlof, K.Czapla, B.Korochwiec, P.Warszyński, K.Małysa, E.Rogalska, "Monitoring of Enzymatic Hydrolysis of Phospholipids at Solid/Liquid and Air/Water Interfaces by Dynamic Surface Activity of Its Products", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.56 [ISBN 978-83-60514-16-0]
56. Ż.Kalemba, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów polimerowych bazujących na solach polianiliny", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.63 [ISBN 978-83-60514-15-3]
57. Ż.Kalemba, E.Lalik, A.Drelinkiewicz, E.Biełańska "Nanorurki węglowe jako nośnik dla katalizatorów aktywnych w procesie wytwarzania bioestrów", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, [ISBN 978-83-62139-47-7]
58. M.Kamińska, M.Woch, E.Biełańska, A.Kowal "Synthesis and Morphology of CuO Nanoparticles Produced by Simple Wet Chemical Method", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.106 [ISBN 978-83-60514-17-7]
59. R.Karcz, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Wpływ położenia kobaltu w heteropolizwiazku na jego aktywność katalityczną w reakcji utleniania fenolu dioctanem jodozobenzenu", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.10 [ISBN 978-83-60514-15-3]
60. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, M.Szaleniec, E.M.Serwicka "Wpływ temperatury reakcji na selektywność reakcji utleniania cykloheksenu w obecności lakunarnych anionów Keggina modyfikowanych kobaltem", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.66 [ISBN 978-83-60514-15-3]
61. H.Kazimierzczak, P.Ozga, R.P.Socha "Investigation of Electrochemical Co-deposition of Zinc and Molybdenum from Citrate Solutions", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.108 [ISBN 978-83-60514-17-7]
62. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Multilayer Polymer Films as Functional Membranes and Coatings for Nanocapsules in Application for Molecular Biomedicine", Poster Presentations, 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012, p.191
63. A.Kolak, M.Niemczyk-Wrzeszcz, M.Zimowska, P.Kuśtrowski, P.Michorczyk "Synteza, charakterystyka fizykochemiczna i właściwości katalityczne tlenków otrzymanych na drodze nanoreplikacji", Chemik (7) (2012) [ISBN 0009-2886]
64. D.Knack. C.Hagel. M.Szaleniec. A.Dudzik. A.Salwinski, J.Heider "Application Potential of Ethylbenzene Dehydrogenase for Hydroxylation of Aromatic Hydrocarbons to Chiral Alcohols", Book of Abstracts. 6^h Int. Congr. Biocatalysis BIOCAT 2012, Hamburg 2012, p.98-99 [ISBN 978-41492-50-9]

65. M.Kolasińska-Sojka, G.Potasiewicz, A.Pajor-Swierzy, P.Warszyński "Electroactive Properties of the Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", Book of Abstracts: 14th Int. Conf. Organized Molecular Films ICOMF14, Paris 2012, p.155
66. J.Korecki, M.Zajac, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, K.Freindl, A.Kozioł-Rachwał, M.Ślęzak, T.Ślęzak "FeO Monolayer Films on Pt(111): Unusual Magnetism and Lattice Dynamics", Book of Abstracts. Conf. 'Phonons in Crystals and Nanomaterials - Progress in Modeling and Experimental Techniques' dedicated to Professor Krzysztof Parliński to celebrate 50 years of his scientific work, Kraków 2012, p.8
67. D.Kosior, R.Todorov, D.Exerowa, K.Małyśa "Properties of n-Octanol Stabilized Thin Liquid Films under Static and Dynamic (Colliding Bubble) Conditions", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.96 [ISBN 978-83-60514-16-0]
68. D.Kosior, J.Zawała, M.Krasowska, K.Małyśa "On the Mechanism of the Action of Frothers in the Colliding Bubble Attachment to Hydrophobic Surfaces of Different Roughness", 26th Int. Mineral Processing Congr. IMPC 2012, New Delhi 2012, p.03206-03215
69. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of the Surface Active Substances on the Bubble Impact Velocity, Bouncing and the Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Solid Surfaces", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.50 [ISBN 978-83-60514-16-0]
70. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Effect of the Frother Overdosage on Kinetics of the Three-Phase Contact Formation at Hydrophobic Surfaces", Proc. 19th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS2012, Edmonton 2012
71. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of the Impact Velocity on Stability of the Foam Films Formed by the Rising Bubbles", 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012
72. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Synteza nośnikowych katalizatorów palladowych metodą mikroemulsji „water-in-oil”. Wpływ właściwości nośników", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.73 [ISBN 978-83-60514-15-3]
73. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Synteza nośnikowych katalizatorów palladowych metodą mikroemulsji „water-in-oil”. Wpływ właściwości nośników", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.M58 [ISBN 978-83-62139-47-7]
74. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, E.Bielańska, A.Drelinkiewicz "Water-in-Oil Microemulsion Method for Preparation of Pd- size Controlled Catalysts", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.110 [ISBN 978-83-60514-17-7]
75. A.Kowal, R.R.Adzic, M.Mosiąlek, G.Modarski, M.Kopczyk "Catalysts for Ethanol Oxidation in Ethanol Solid Oxide Fuel Cells (ESOFc)", Book of Abstracts. Energy & Materials Research Conf. EMR 2012, Torremolinos 2012, p.183

76. A.Kowal, R.R.Adzic, M.Mosiąlek, G.Mordarski, M.Kopczyk "Czysta energia z etanolu (synteza i własności katalizatorów do utleniania etanolu w ogniowach paliwowych)", *Chemik* (7) (2012) 175 [ISBN 0009-2886]
77. M.Kozieł, M.Oszajca, A.Rafalska-Łasocha, E.Nosek, W.Łasocha "XRPD Investigations of the Ancient Coins and Other Metal Objects", *Book of Abstracts. 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Anniversary of Crystal X-Ray Diffraction*, Kraków 2012, p.39
78. A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Freindl, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Zajac, J.Korecki "Perpendicular Magnetic Anisotropy in Epitaxial Fe/MgO Multilayers", *Book of Abstracts. Joint European Magnetic Symp. JEMS 2012, Parma 2012*
79. A.Kozłowska, B.Jachimska "Protonowanie lizozymu, a proces adsorpcji na powierzchni miki", *Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012*, p.135
80. A.Kozłowska, B.Jachimska "Badanie właściwości rozgałęzionej polietylenoiminy (PEI) za pomocą mikrowagi kwarcowej z monitorowaniem dyssypacji (QCM-D)", *Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012*, p.414
81. P.Kozyra, M.Radoń, J.Datka, E.Broclawik "Spin Resolved Charge Flow Analysis of a Molecule Activation by the Catalytic Site: NO at the Copper Site in a Zeolite", *Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012*, p.220 [ISBN 978-83-60514-15-3]
82. P.Kozyra, M.Radoń, J.Datka, A.Stepniowski, E.Broclawik "Kanały przepływu elektronów a aktywacja cząsteczki NO na centrum miedzi(I) w zeolicie", *Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012*, p.84 [ISBN 978-83-62139-47-7]
83. T.Kruk, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, J.Stefańska, P.Warszyński "Multifunkcyjne wielowarstwowe powłoki polimerowe", *Materiały Zjazdowe. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, PTChem, Białystok 2012*, p.155 [ISBN 978-83-60988-12-1]
84. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Thin Films with Antimicrobial Properties", *Book of Abstracts. 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012*, paper P5-9
85. M.Krzak, K.Szczepanowicz, K.Podgórna, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński "The Influence of the Encapsulated Anti-corrosion Agents on the Corrosion Resistance of AA2014 Alloy", *Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012*, p.199 [ISBN 978-83-60514-15-3]
86. M.Krzak, K.Szczepanowicz, K.Podgórna, G.Mordarski, L.Szyk-Warszyńska, P.Nowak, P.Warszyński "Fluorescence Microscopy and Electrochemical Study of the Interaction of Polyelectrolyte Capsules Containing Anticorrosive Agents with AA2024 Alloy Surface", *3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012*, p.113 [ISBN 978-83-60514-17-7]

87. M.Krzak, Z.Tabor, P.Nowak, P.Warszyński, "Investigation of Water Diffusion process in Composite Anticorrosive Epoxy Coatings", Proc. World Forum on Advanced Materials POLYCHAR 20, Dubrovnik 2012, p.219
88. M.Krzak "Automatic and Direct Investigation of Bubble Motion in Aqueous Surfactant Solutions by Using Digital Image Processing Techniques", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.72 [ISBN 978-83-60514-17-7]
89. M.Krzak, H.Caps, N.Vandewalle "High Stability of the Bovine Serum Albumine Foams Evidenced in Hele-Shaw Cell", Book of Abstracts. 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012, p.87
90. M.Krzak, E.Jarek, P.Warszyński, E.Rogalska "Fast Method for Detection of Water Soluble Surface-Active Products of Enzymatic Reaction by Monitoring of the Bubble Velocity Variations", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.200 [ISBN 978-83-60514-15-3]
91. M.Krzak, E.Jarek, P.Warszyński, E.Rogalska "Fast Method for Detection of Water Soluble Surface-Active Products of Enzymatic Reaction by Monitoring of the Bubble Velocity Variations", Book of Abstracts. 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012, p.179
92. M.Krzak, K.Małyś "Effect of the Surfactant Polar Group on the Bubble Rising Velocity", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.124 [ISBN 978-83-60514-16-0]
93. M.Krzak, P.Zychowska, J.Zawała, K.Małyś "Monitoring of Waters Pollution by Measurements the Bubble Velocity Variations", Proc. 19th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS2012, Edmonton 2012
94. M.Krzak, P.Zychowska, J.Zawała, K.Małyś "Monitoring of Waters Pollution by Measurements the Bubble Velocity Variations", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.113 [ISBN 978-83-60514-16-0]
95. E.Lalik "Noble Gas-induced Oscillatory Kinetics in Pd/Hydrogen System", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.67 [ISBN 978-83-60514-17-7]
96. E.Lalik, M.Góral "An Empirical Dependence of Frequency in the Oscillatory Sorption of H₂ and D₂ in Pd on the First Ionization Potential of Noble Gases (He, Ne, Ar, Kr) and N₂", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.201 [ISBN 978-83-60514-15-3]
97. E.Lalik, D.Vujadinovic, M.Oćwieja, A.Martyła, A.Kowal "Sustained Oscillations on Pd Nanoparticles Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.176 [ISBN 978-83-60514-17-7]

98. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Organiczno-nieorganiczne związki warstwowe", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.164 [ISBN 978-83-60514-15-3]
99. A.Martyła, E.Bielańska, F.Soita Jumbe, P.Handzlik, A.Kowal "Morphology of Minerals from Kilimanjaro Region", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.122 [ISBN 978-83-60514-17-7]
100. L.Matachowski, J.Gurgul, M.Zimowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha "Stabilność termiczna soli heteropolikwasu $H_3PW_{12}O_{40}$ podstawionego jednowartościowymi kationami Na^+ , K^+ , Cs^+ i Ag^+ ", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.222 [ISBN 978-83-60514-15-3]
101. L.Matachowski, M.Zimowska, W.Rojek, T.Machej, J.Gurgul, R.Socha, D.Mucha "Dehydratacja n-butanolu na $H_3PMo_{12}O_{40}$ i $Ag_3PMo_{12}O_{40}$ w obecności powietrza", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.221 [ISBN 978-83-60514-15-3]
102. J.Matusik, M.Zimowska, T.Bajda "Modified Kaolinites and Halloysite with Anion Sorption Properties", Book of Abstracts. 6th Mid-European Clay Conf. MECC'12, Prague 2012, p.70 [ISSN 1802-2480, ISSN 1802-2499]
103. A.Micek-Ilnicka, E.Bielańska, A.Bielański "Nanorurki węglowe jako nośnik heteropolikwasów katalizujących konwersję alkoholu etylowego", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.130 [ISBN 978-83-62139-47-7]
104. A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Carbon Nanotubes as the Support for Heteropolyacid Catalysts", Book of Abstracts. 19th Zeolite Forum, Małe Ciche, Kraków 2012, p.24 [ISBN 978-83-92-9430-7-5]
105. A.Michalik-Zym, E.Bielańska, R.Dula, D.Mucha, B.D.Napruszewska, E.M.Serwicka, M.Zimowska, "Wpływ wybranych parametrów syntezy na właściwości fizykochemiczne mieszanych tlenków CuMnAl otrzymanych z prekursorów hydrotalkitowych", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.170 [ISBN 978-83-60514-15-3]
106. A.Michalik-Zym, E.Bielańska, R.Dula, D.Mucha, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Influence of Selected Synthesis Parameters on the Physicochemical Properties of Hydrotalcite-derived Cu-Mn-Al Mixed Oxides", Book of Abstracts. 6th Mid-European Clay Conf. MECC'12, Prague 2012 p.131 [ISSN 1802-2480, ISSN 1802-2499]
107. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetics of Particle Deposition Studied by Fluorescent Imaging and Streaming Potential Measurements", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.128 [ISBN 978-83-60514-17-7]
108. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetics of Fluorescent Particles Deposition at Polyelectrolyte Monolayers", Program & Book of Abstracts. 10th Conf. Colloid Chemistry, Hungarian Chemical Society, Budapest 2012, p.50 [ISBN 978-963-9970-26-7]

109. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetyka osadzania fluorescencyjnych cząstek lateksowych na monowarstwach polielektrolitów", Materiały Zjazdowe. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, PTChem, Białystok 2012, p.150-151 [ISBN 978-83-60988-12-1]
110. A.Mińczewska, E.Broclawik, T.Borowski "DFT Study on the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase", Book of Abstracts. 11th European Biological Inorganic Chemistry Conf., Granada 2012, p.163 [ISBN 978-84-338-5418-6]
111. A.Mińczewska, M.Chruszcz, P.Porębski, K.Tkaczuk, W.Minor, T.Borowski "5-Methylthio-3-oxo-1-penten-1,2-diol Dioxygenase - Studies on the Structure and Function of the Metalloenzyme", Book of Abstracts. 11th European Biological Inorganic Chemistry Conf., Granada 2012, p.275 [ISBN 978-84-338-5418-6]
112. A.Mińczewska, A.Wójcik, E.Broclawik, T.Borowski "Modelling Reaction Mechanisms of Nonheme Enzymes Producing Oxoferryl Species", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.136 [ISBN 978-83-60514-15-3]
113. J.Mizera, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Socha, R.Grabowski "Badania wpływu metody nanoszenia złota 'osadzanie-strącanie' na obniżenie stężenia mobilnych form tlenu na nośniku", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.171 [ISBN 978-83-60514-15-3]
114. E.Młyńczak, J.Gurgul, N.Spiridis, J.Korecki "Exchange Bias in Fe/CoO(001) and Fe/CoO(111) Bilayers", Book of Abstracts. Joint European Magnetic Symp. JEMS 2012, Parma 2012
115. Ł.Mokrzycki, T.Machej "The Synthesis of a Structured Catalyst for a Total Oxidation of VOC (I): Ceramic Foam Carrier Preparation", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.172 [ISBN 978-83-60514-15-3]
116. Ł.Mokrzycki, T.Machej, A.Chojnačka, A.Kwapisz "The Synthesis of a Structured Catalyst for a Total Oxidation of VOC (II): Mn-Cu Catalyst Synthesis via Microemulsion Method", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.173 [ISBN 978-83-60514-15-3]
117. G.Mordarski, M.Mosiąlek, P.Nowak, M.Tatko "Direct Carbon Molten Carbonate Fuel Cell with Electrolyte-combined LiAlO₂ Matrix Fabricated by the Tap-casting Method", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.129 [ISBN 978-83-60514-17-7]
118. M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, R.P.Socha, G.Mordarski, A.Rapacz-Kmita "Oxygen Reduction Reaction on Silver Investigated with the Use of Silver Point Electrode and 20gdc Electrolyte", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.134 [ISBN 978-83-60514-17-7]
119. M.Mosiąlek, G.Mordarski, M.Dudek, E.Bieleńska, J.Wojewoda-Budka, M.Tatko "Silver/LSM Composite Cathodes for SOFC, Preparation and Stability", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.133 [ISBN 978-83-60514-17-7]

120. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, K.Jamroży, D.Dronka-Góra, M.Góra, B.Kozik, M.K.Łuczyński, E.Bielańska, "Mechanisms of cellulose fiber size reduction determined via SEM and optical microscopy", Conference Abstracts/CD and Program Booklet. 11th Int. Conf. Nanostructured Materials NANO2012, International Nano Society, LLC, Rhodes 2012, p.47-47
121. G.Nawrat, M.Gonet, T.Wieczorek, P.Nowak, "Electrode Materials for Hydrogen Evolution and Hydrogen Oxidation Reactions", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.138 [ISBN 978-83-60514-17-7]
122. A.Nieciowska, M.Krasowska, J.Ralston, K.Małyś "Influence of Bubble Size on Kinetics of Three Phase Contact Formation at Modified Titanium Dioxide Surfaces", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.88 [ISBN 978-83-60514-16-0]
123. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Struktura elektronowa modyfikowanych heteropolikwasów wolframowych. Obliczenia klasterowe DFT", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.137 [ISBN 978-83-60514-15-3]
124. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Electronic Properties of Modified Tungsten and Molybdenum Heteropolyacids. Cluster DFT Calculations", Book of Abstracts. 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012, p.89-90
125. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "DFT Studies of Modified Tungsten and Molybdenum Heteropolyacids", Book of Abstracts, 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012, p.354 [ISBN 978-83-60988-11-4]
126. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów molibdenowych", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.164 [ISBN 978-83-62139-47-7]
127. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Metoda DFT jako narzędzie opisu struktury elektronowej modyfikowanych heteropolikwasów", Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, p.307
128. M.Nosek, P.Weroński "Application of Electrochemical Techniques to Study Colloidal Films", Book of Abstracts. 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012, p.63
129. M.Nosek, P.Weroński, P.Nowak "Electrochemical Impedance Spectroscopy as a Tool for Characterization of Colloid Particle Monolayers", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.139-140 [ISBN 978-83-60514-17-7]
130. M.Nosek, P.Weroński "Cyclic Voltammetry as a Tool for Characterization of Lipid Vesicles", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.120 [ISBN 978-83-60514-16-0]

131. P.Nowak, G.Mordarski, E.Bielańska, D.Mucha, R.Dula "Controlled Galvanic Deposition of High Quality Nickel-rhenium Alloys", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.131 [ISBN 978-83-60514-17-7]
132. K.Onik, E.Włoch, M.Derewiński, E.Ember, J.A.Lercher "Nowe materiały warstwowe jako katalizatory reakcji prowadzonych w fazie ciekłej", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.175 [ISBN 978-83-60514-15-3]
133. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Zeolite Precursors Based Layer Materials - New Catalysts for the Liquid Phase Reactions", Proc. 11th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Obergurgl 2012, p. 51 [ISBN 978-3-900554-71-2]
134. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Catalytic Properties of New Laminar Materials Based on Nanoparticles of Zeolites", Book of Abstracts. 19th Zeolite Forum, Mała Ciche, Kraków 2012, p.40 [ISBN 978-83-92-9430-7-5]
135. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Warstwowe struktury porowate otrzymane w wyniku usieciowania zawiesin nanocząstek zeolitu MFI", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska, Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.166 [ISBN 978-83-62139-47-7]
136. M.Oszajca, A.Drzewiecka-Matuszek, A.Franke, M.Brindell, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, G.Stochel, R.Van Eldik "The Effect of N-Methylimidazole on the Reactivity of Model Complex of Compound II. A Combined Experimental and Theoretical Study", Acta. Int. Symp. Metal Complexes ISMEC, Lisbon 2012, vol.2, p.216-217 [ISSN: 2239-2459]
137. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, E.Bielańska, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Composites Containing Carbon Nanotubes and Nickel Compounds Prepared via Catalytic Chemical Vapour Deposition", Book of Abstracts, Annual World Conf. on Carbon, Kraków 2012, p.89 [ISBN 978-83-60958-99-5]
138. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, E.Bielańska "Preparation and Characterization of the Electroactive Composites Containing Nickel Nanoparticles and Carbon Nanotubes", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IkiFP PAN, Krakow 2012, p.141-142 [ISBN 978-83-60514-17-7]
139. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Zimowska, M.Rugierro-Mikołajczyk "Examination of New Composites Derived from Co/Ni/Al Layered Double Hydroxides as Electrode Materials", Book of Abstracts, Annual World Conf. on Carbon, Kraków 2012, p.86 [ISBN 978-83-60958-99-5]
140. A.Pacuła, R.P.Socha, M.Zimowska "Electrochemical Oxygen Reduction Reaction by Co Nanoparticles Supported on Nitrogen-doped Nanostructured Carbon", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.94 [ISBN 978-83-60514-15-3]

141. A.Pacuła, R.P.Socha, M.Zimowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, P.Nowak, "Preparation of Electrocatalysts Containing Cobalt Nanoclusters and Nitrogen-doped Carbon Nanotubes and Their Activities for Oxygen Reduction Reaction in Alkaline and Acidic Media", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.141 [ISBN 978-83-60514-17-7]
142. A.Pacuła, K.Uosaki "Characterization of Electrochemical Features and Physicochemical Properties of the Composites Containing Cobalt and Nitrogen-doped Graphite-like Carbon" Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.143-144 [ISBN 978-83-60514-17-7]
143. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "The Effect of Conductive Polyelectrolytes on the Formation of Electroactive Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles and Their Application for H₂O₂ Detection", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.203 [ISBN 978-83-60514-15-3]
144. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "The Formation and Electrocatalytic Properties of the Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.145 [ISBN 978-83-60514-16-0]
145. H.Pálková, Ľ.Jankovič, V.Hronský, M.Zimowska, J.Madejová "Effect of Acid Treatment on the Organo-montmorillonite Structure", Book of Abstracts. 6th Mid-European Clay Conf. MECC'12, Prague 2012, p.730 [ISSN 1802-2480, ISSN 1802-2499]
146. K.Pamin, R.Karcz, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Sulfonowane metaloftalocyjaniny jako katalizatory reakcji utleniania fenolu", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.170 [ISBN 978-83-60514-15-3]
147. T.Pańczyk "A Magnetically Controlled Nanocontainer Composed of Magnetic Nanoparticles and Carbon Nanotubes. Monte Carlo Predictions of Its Properties", Book of Abstracts, 5th Int. Conf. Molecular Materials MOLMAT 2012, Barcelona 2012, p.331
148. T.Pańczyk, W.Rudziński" Surface Heterogeneity of Multi-Walled Carbon Nanotubes Studied By Means Of Molecular Dynamics Simulations", Book of Abstracts, 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012 [ISBN 978-83-60988-11-4]
149. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Polyelectrolyte Coated Nanocapsules: Neuroprotective Drug Delivery System", Book of Abstracts. 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012, paper.P1.4
150. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-core and (bio)Polyelectrolyte Shell Nanocapsules for Neuroprotective Drug Delivery", Book of Abstracts. Konf. Nano-Biotechnology PL 2012, Warszawa 2012 p.57
151. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "Interactions between Fenoterol and beta2-Adrenergic Receptor: the Stereoselective Binding and the Ligand Association/Dissociation Profiles", Book of Abstracts. 5th Conversatory on Medicinal Chemistry, Lublin 2012

152. W. Płaziński "Sorption of Metal Cation by Alginate-based Biosorbents: Determination of the Thermodynamic Parameters", Proc. 6th Pacific Basin Conf. Adsorption Science and Technology, Taipei 2012
153. W. Płaziński "Sorption of Metal Cation by Alginate-based Biosorbents: Determination of the Thermodynamic Parameters", Book of Abstracts. 22nd Int. Conf. Chemical Thermodynamics, Buzios 2012
154. W. Płaziński, M. Drach "The Dynamics of Calcium Binding by Alginates. Application of the Transition Path Sampling Method", Book of Abstracts. 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012 [ISBN 978-83-60988-11-4]
155. W. Płaziński, M. Drach "Calcium Binding by Alginates. Insight into the Molecular Details of the Process Dynamics", Proc. 6th Pacific Basin Conf. Adsorption Science and Technology, Taipei 2012
156. W. Płaziński, M. Drach "Calcium Binding by Alginates. Exploring the Free Energy Landscapes by the Transition Path Sampling Method", Book of Abstracts. 22nd Int. Conf. Chemical Thermodynamics, Buzios 2012
157. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "The 'Order-to-Disorder' Conformational Transition in CD44 Protein: an Umbrella Sampling Snalysis", 5th Conversatory on Medicinal Chemistry. Book of Abstracts. 5th Conversatory on Medicinal Chemistry, Lublin 2012
158. W. Płaziński, W. Rudziński "Sorption of Metal Cation by Alginate-based Biosorbents: Determination of the Thermodynamic Parameters", Book of Abstracts. 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012 [ISBN 978-83-60988-11-4]
159. M. Pokora, L. Horla, A. Martyla, E. Bielańska, A. Kowal "Synthesis and Propertis of SnO₂ Nanograins", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.149 [ISBN 978-83-60514-17-7]
160. M. Radoń, E. Broclawik, K. Pierloot "Spin State Energetics of Heme-Related Models from DFT and ab initio Calculations", Proc. CECAM Conf. Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry, Saragossa 2012
161. M. Radoń, J. Szklarzewicz, E. Broclawik "Stany spinowe centrów hemowych i modeli hemopodobnych", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K. Podolska Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.115 [ISBN 978-83-62139-47-7]
162. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, E. Doleżyńska Sewerniak, W. Łasocha "X-Ray Powder in Investigations of Yellow Earth Pigments", Book of Abstracts. 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Aniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Kraków 2012, p.43

163. A.Rafalska-Łasocha, M.Grzesiak, J.Olszewska-Świetlik, B.Szmelter-Fausek, W.Łasocha "X-Ray Powder Micro-diffraction Investigations of Selected Pigments in Seventeenth-century Paintings., Book of Abstracts. 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Aniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Kraków 2012, p.37
164. A.Rugor, J.Demer, M.Szaleniec, A.Bojarski, M.Witko, M.Boll, G.Fuchs "Nowa C-25 hydroksylaza steroidowa jako użyteczne narzędzie do syntezy farmaceutyków", Chemik (7) (2012) 209 [ISBN 0009-2886]
165. A.Rugor, J.Dermer, M.Szaleniec, M.Witko, A.Bojarski "A Novel Steroid C-25 Dehydrogenase as a Useful Tool in Synthesis of Pharmaceuticals", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.24 [ISBN 978-83-60514-15-3]
166. D.Rutkowska-Żbik, T.Korona "Możliwości kompleksowania porfiryny magnezu – badania metodą rachunku zaburzeń o adaptowanej symetrii", Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, p.316
167. D.Rutkowska-Żbik, W.Macyk "Badanie właściwości fotochemicznych kompleksów Ti(IV) metodą TD-DFT", Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, p.317
168. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "DFT Studies on the Active Phase Composition of MoO₃/ZSM-5 and its Influence on Methane Aromatization Reaction", Book of Abstracts, 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012, p.352-353 [ISBN 978-83-60988-11-4]
169. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Catalytic Methane Aromatization on MoO₃/ZSM-5: Theoretical Studies on Reaction Mechanism", Conf. Information & Abstracts. Conf. Modeling & Design of Molecular Materials 2012, Wrocław 2012, p.33A
170. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Opis mechanizmu procesu aromatyzacji metanu na katalizatorach opartych na MoO₃. Obliczenia klasterowe DFT", Materiały. 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012, p.318
171. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Alternatywna technologia przeróbki metanu: aromatyzacja na katalizatorze MoO₃/ZSM-5. Opis fazy aktywnej i mechanizmu reakcji", Chemik (7) (2012) 169 [ISBN 0009-2886]
172. D.Rutkowska-Żbik, A.A.Umińska, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Mechanizm epoksydacji cykloheksenu w warunkach katalitycznych i przez bezpośrednią reakcję z nadtlenokwasami", Chemik (7) (2012) 186 [ISBN 0009-2886]
173. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, A.Kania, Ł.Orzeł, G.Stochel, L.Fiedor, M.Pilch "Badania nad właściwościami koordynacyjnymi chlorofili w rozpuszczalnikach organicznych", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.125 [ISBN 978-83-60514-15-3]

174. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Transmetallation of Porphyrins: DFT Mechanistic Studies", Book of Abstracts. 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012, p.48-49
175. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Theoretical Modeling of Chlorophylls and Their Derivatives as Potential Therapeutic Agents", Conf. Information & Abstracts. Conf. Modeling & Design of Molecular Materials 2012, Wroclaw 2012, p.L28
176. M.Sadowska, K.Jamroży, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, D.Dronka-Góra, M.Góra, B.Kozik, M.K.Łuczyński, E.Bielańska "Changes of Cellulose Particles' Size upon Hydrothermal Treatment Determined via Laser Diffraction, SEM and Optical Microscopy", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imagining/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.153 [ISBN 978-83-60514-17-7]
177. R.P.Socha, J.Gurgul, M.Szczepanik-Ciba, E.Madej, B.Figarska, J.Przewoźnik, N.Spiridis, J.Korecki "Electronic and Magnetic Properties of the Fe/MnO(100) Interface", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imagining/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.163 [ISBN 978-83-60514-17-7]
178. R.P.Socha, E.Madej, B.Figarska, J.Gurgul, J.Przewoźnik, N.Spiridis, M.Szczepanik, J.Korecki "Właściwości elektronowe i magnetyczne interfejsu Fe/MnO(100) przed i po wygrzaniu", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.206 [ISBN 978-83-60514-15-3]
179. R.Socha, M.Szczepanik-Ciba, B.Strzelczyk, E.Madej, B.Figarska, N.Spiridis, J.Korecki "Epitaxial Layers of Mixed Iron Manganese Oxides: Surface Properties and Reactivity", Book of Abstracts. 16th Int. Conf. Solid Films and Surfaces, Genoa 2012, paper TueM-CAT2.4-5H
180. R.P.Socha, M.Zimowska, L.Matachowski, J.Dziedzic, J.Gurgul "Wpływ promieniowania UV na powierzchnie soli $Ag_3PW_{12}O_{40}$ i $Ag_3PMo_{12}O_{40}$ w warunkach normalnych", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.20 [ISBN 978-83-60514-15-3]
181. R.P.Socha, M.Zimowska, L.Matachowski, J.Dziedzic, J.Gurgul "The Influence of UV Illumination on $Ag_3PW_{12}O_{40}$ and $Ag_3PMo_{12}O_{40}$ Surfaces in Standard Conditions", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imagining/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.164 [ISBN 978-83-60514-17-7]
182. R.P.Socha, M.Zimowska, L.Matachowski, J.Gurgul, D.Mucha, J.Dziedzic "Silver Nanostructures Grown on Heteropolyacid Salts", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imagining/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.62 [ISBN 978-83-60514-17-7]
183. M.Sowa, R.P.Socha, W.Simka "Anodic Oxidation of Zirconium in Silicate Solutions", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imagining/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.162 [ISBN 978-83-60514-17-7]
184. B.Sulikowski "Impact of Solid State NMR on Physicochemistry of Zeolites and Heteropolyacids", 44th Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków 2012, p. 55 [www.ifj.edu.pl/reports/2012/]

185. B.Sulikowski, D.Szepietowska "Solid-state NMR Studies of Ultrastable Zeolite Y", Book of Abstracts. 19th Zeolite Forum, Mañe Ciche, Kraków 2012, p.47-48 [ISBN 978-83-92-9430-7-5]
186. M Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "The Influence of the Protein Environment on the Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase - a QM:MM Study", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.27 [ISBN 978-83-60514-15-3]
187. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Tataruch, K.Szymańska, A.Jarzębski, J. Bryjak, M.Witko "Zastosowanie dehydrogenazy (S)-1-fenylotanolowej do syntezy chiralnych alkoholi drugorzędowych", Chemik (7) (2012) 167 [ISBN 0009-2886]
188. M.Szaleniec, A.Dudzik, M.Tataruuch, M.Witko, D.Knack, J.Heider "Enantioselective Hydroxylation by Ethylbenzene Dehydrogenase - Origins of Enantioselectivity", Book of Abstracts. 6th Int. Congr. Biocatalysis BIOCAT 2012, Hamburg 2012, p.262 [ISBN 978-41492-50-9]
189. M.Szczepanik, N.Spiridis, E.Madej, B.Figarska, R.P.Socha, B.Strzelczyk, J.Korecki "Charakteryzacja struktury i stanów elektronowych epitaksjalnej warstwy spinelu Mn₃O₄ na podłożu Fe₃O₄(100)", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.208 [ISBN 978-83-60514-15-3]
190. M.Szczepanik-Ciba, N.Spiridis, E.Madej, B.Figarska, R.P.Socha, B.Strzelczyk, J.Korecki "Structure and Electronic States of Epitaxial Mn₃O₄ Film on Fe₃O₄ Substrate", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.165 [ISBN 978-83-60514-17-7]
191. K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, M.Piotrowski, K.Podgórna, D.Jantas, W.Lasoń, M.Dziedzicka-Wasylewska, P. Warszyński "Emulsion based nanocapsules for targeted drug delivery systems" Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.121 [ISBN 978-83-60514-16-0]
192. K.Szczepanowicz, K.Podgórna., M.Krzak, M.Elżbieciak-Wodka, Sz.Wojtyła, J.Zawała, P.Nowak, P.Warszyński "Emulsion based Capsules for Corrosion Protection", Book of Abstracts. 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.105 [ISBN 978-83-60514-16-0]
193. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, T.Kruk, M.Piotrowski, P. Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as Drug Carriers", Book of Abstracts. Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012, p.P3.61
194. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, M.Piotrowski, P. Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules with Emulsion Core", Poster Presentations, 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012, p.118
195. D.Szepietowska, B.Sulikowski "Synthesis of Ammonium Salts of 12-Tungstophosphoric Heteropolyacid", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.181 [ISBN 978-83-60514-15-3]

196. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, J.Piekoszowska, R.Socha, P.Warszyński "Thickness and Stability of PLL/Casein and PLAr/Casein Multilayer Films", Book of Abstracts, 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012, paper P5-12
197. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, J.Piekoszewska, R.P.Socha, P.Warszyński "PLL/Casein and PLAr/Casein Multilayer Films- formation and stability", Program and Oral Presentations. 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012, p.134
198. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, P.Warszyński "Bild-up of poly-L-Arginine/Casein Multilayer Films on Solid Substrates", Book of Abstracts, COST CM1101 Workshop Nano-biocolloidal materials and non-equilibrium self-assembly, Barcelona 2012, p.25
199. L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, T.Kruk, M.Zimowska, R.Wendelbo, P.Warszyński "The Effect of UV, Chemical and Heat Treatment on Foramation of Graphene Films from Graphene Oxide" Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.209 [ISBN 978-83-60514-15-3]
200. L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, T.Kruk, M.Zimowska, R.Wendelbo, P.Warszyński "The Effect of Heat Treatment on Formation of Graphene/PEI Films from Graphene oxide/PEI Multilayers", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.174 [ISBN 978-83-60514-17-7]
201. A.Szymańska, W.Łasocha, R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz "Badanie właściwości katalitycznych tlenowych kompleksów molibdenu w procesie utleniania cykloalkanów", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.104 [ISBN 978-83-60514-15-3]
202. A.Szymańska, W.Nitek, W.Łasocha "Synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne związku $\{MoO_3[C_6H_4(NH_2)_2]\}_n$ ", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.182 [ISBN 978-83-60514-15-3]
203. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, N.Spiridis, T.Ślęzak, E.Młynczak, M.Zajac, M.Chrobak, M.Czapkiewicz, M.Dobrzański, T.Kołodziej, A.Kozłowski, M.Wojtyniak, R.Zdyb, F.Nolting, A.Kleibert, N.Pilet, J.Raabe, B.Sarafimov, C.Quitmann, J.Korecki, "Polish PEEM at Swiss Light Source", Proc. 7th Int. Workshop Nano-scale Spectroscopy and Nanotechnology, Zurich 2012
204. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, R.Zdyb, N.Spiridis, C.Quitmann, J.Raabe, J.Korecki, "Magnetic Properties of Fe Nanostructures on W(110) Studied with PEEM", Abstracts Distinguished Guest Lectures & Oral Presentations. 8th Int. Workshop on LEEM/PEEM, Hong Kong 2012
205. M.Śliwa, R.Grabowski, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.Mizera "Acidic Component Influence on Catalytic Properties of Hybrid Catalysts for Dimethyl Ether Synthesis", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.105 [ISBN 978-83-60514-15-3]

206. M.Tataruch, M.Szaleniec, J.Bryjak, K.Szymańska, A.Dudzik, J.Opalinska-Piskorz, M.Witko, A.Jarzębski, E.Luchter-Wasylewska, J.Heider "Immobilizowane dehydrogenazy etylobenzenowa i fenyloetanolowa jako narzędzia do biosyntezy chiralnie czystych składowych leków" Materiały Zjazdowe. 3. Ogólnopolskie Symp. Nowoczesne Techniki Badawcze w Ocenie Jakości Produktów Leczniczych, Lublin, 2012, p.82
207. M.Tataruch, M.Szaleniec, A.Dudzik, K.Szymańska, M.Witko, J.Bryjak, A.Jarzębski, J.Heider, E.Luchter-Wasylewska "Immobilizacja dehydrogenaz etylobenzenowej i fenyloetanolowej", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.287 [ISBN 978-83-60514-15-3]
208. M.Tatko, M.Mosiąlek, E.Bielańska "Synthesis and Characterization of Silver Containing LSCF", Materiały. 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, (K.Podolska Ed.), Wydawnictwo Attyka, Kraków 2012, p.174 [ISBN 978-83-62139-47-7]
209. V.Ulaganathan, M.Lotfi, M.Karbaschi, M.Krzan, K.Małyś, G.Gotchev, A. avadi, R.Miller "Studies on the Bubble Rising in Mixed Protein/Surfactant Solutions", Book of Abstracts. 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012
210. A.A.Umińska, A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Otrzymywanie epitenku cykloheksenu w warunkach katalitycznych oraz przez bezpośrednią reakcję z nadtlenokwasami - badania teoretyczne metodą DFT", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.142 [ISBN 978-83-60514-15-3]
211. P.Warszyński, M.Elżbieciak-Wodka, A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka "Electrochemical Probing of Polyelectrolyte Multilayers", Book of Abstracts. 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012, p.71 [ISBN 978-83-60514-17-7]
212. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Hydrogen Atom Abstraction vs Electrophilic Attack on Aromatic Ring by Non-heme Fe(IV)=O. HMS and HPPD Case Studies", Book of Abstracts. 11th European Biological Inorganic Chemistry Conf., Granada 2012, p.359 [ISBN 978-84-338-5418-6]
213. J.Zawała, T.Dąbroś "Settling Properties of Aggregates in Paraffinic Bitumen Froth Treatment", Proc. 19th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS2012, Edmonton 2012
214. M.Zimowska, R.Dula, R.P.Socha, J.Gurgul, B.Napruszewska, J.Plona, E.M.Serwicka "Nanostruktura quasi-amorficznych katalizatorów tlenkowych CuMnAl-O otrzymanych z prekursorów hydrotalkitowych", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.191 [ISBN 978-83-60514-15-3]
215. M.Zimowska, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Dula, E.M.Serwicka "Kontrola nukleacji oraz wzrostu krystalitów warstwowych prekursorów hydrotalkitowych w układzie odwróconej mikroemulsji", Materiały. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2012, p.192 [ISBN 978-83-60514-15-3]

216. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, Z.Olejniczak, K.Pamin, E.M.Serwicka "Alumination of Laponite-derived Porous Clay Heterostructures (PCHs)", *Materiały*. 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2012, p.193 [ISBN 978-83-60514-15-3]
217. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, K.Pamin, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "The Effect of Alumination Process on Surface Acidity of PCH Structures Derived from Laponite", *Book of Abstracts*. 6th Mid-European Clay Conf. MECC'12, Prague 2012 p.62 [ISSN 1802-2480, ISSN 1802-2499]
218. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, K.Pamin, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "Acid Properties of Laponite-derived Porous Clay Heterostructures Modified by Doping with Aluminium", *Book of Abstracts*. 19th Zeolite Forum, Małe Ciche, Kraków 2012, p.61-62 [ISBN 978-83-92-9430-7-5]

ARTYKUŁY W DRUKU

1. Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska, A.Michna, K.Szczepaniak-Lalewicz "Mechanisms of Nanoparticle and Bioparticle Deposition - Kinetic Aspects", *Colloids Surf. A* (2013)
2. E.Jamróz, G.Para, B.Jachimska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A.Para "Albumin-furcellarane Complexes as Cores for Nanoencapsulation", *Colloids Surf. A*, (2013)
3. M.Krzan "Rheology of the Wet Surfactant Foams and Biofoams - a Review", *Zeszyty Naukowe Politechniki Krakowskiej* (2012)
4. M.Krzan, H.Caps, N.Vandewalle "Stability of Bovine Serum Albumine Foams in Hele-Shaw Cell", *Colloids Surf.*, (2013)

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. "3rd International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, May 27th-June 1st, 2012, Kraków, Poland" (G.Mordarski, Ed.), IkiFP PAN, Kraków 2012, pp.181 [ISBN 978-83-60514-17-7]
2. "5th International Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, 20-24.05.2012 Kraków, Poland, Book of Abstracts", IkiFP PAN, Kraków 2012, pp.137 [ISBN 978-83-60514-16-0]
3. "XVII Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, XVII Polish Annual Conference on Catalysis, 14-16.03.2012, Kraków" (B.Rutkowska-Żbik, B.Sulikowski, Eds.), IkiFP PAN, Kraków 2012, pp.239 + CD [ISBN 978-83-60514-15-3]
4. B.Jachimska "Konformacja polielektrolitów i białek w roztworach elektrolitów a topologia tworzonych warstw na powierzchniach modelowych", IkiFP PAN, Attyka, Kraków 2012 [ISBN 978-83-62139-37-8]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY OTRZYMANE

1. A.J.Groszek, J.Haber, E.Lalik "A Method of Activating of a Composition", British Patent GB2453140 (18.01.2012)
2. L.Matachowski, K.Pamin, J.Połtowicz, J.Haber, A.Janitz, K.Magielko, S.Szarlik, S.Piechota "A Process for the Oxidation of Cyclohexane to Cyclohexanol and Cyclohexanone", Indian Patent 254376 (30.10.2012)
3. J.Połtowicz, K.Pamin, E.Serwicka-Bahranowska "Sposób epoksydacji propylenu", Patent RP, wg P.386720 (21.12.2012)

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z.Adamczyk "Protein Adsorption Mechanisms Revealed by Electrokinetic and Microscopic Studies", 4th US-Poland Workshop Interfacial Phenomena at the Nanoscale: Fluids and Soft Matter, Poznan 2012
2. Z.Adamczyk "Mechanism of protein adsorption", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
3. Z.Adamczyk "Małe jest piękne czyli co mogą koloidy", 2. Ogólnopolskie Forum Młodych Chemików, Lublin 2012
4. Z.Adamczyk, J.Barbasz "Nanoparticle and Protein Adsorption Mechanisms Determined by Microscopic and Electrokinetic Studies", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
5. Ł.Bratasz "Międzynarodowe normy i zalecenia dotyczące oświetlenia obiektów zabytkowych", Int. Conf. 'Light in the Museum - Necessity or Threat', Kraków 2012
6. M.Derewiński "Zaawansowane materiały porowate w ochronie środowiska", 2. Warsztaty Naukowe ISD, Ochotnica Dolna 2012
7. T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Ślęzak, J.Korecki "LEEM - powierzchniowa mikroskopia elektronowa", 7. Seminarium 'Badania prowadzone metodami skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań STM/AFM 2012', Zakopane 2012
8. J.Korecki, M.Zajac, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, K.Freindl, A.Kozioł-Rachwał, M.Ślęzak, T.Ślęzak "FeO Monolayer Films on Pt(111): Unusual Magnetism and Lattice Dynamics", Conf. 'Phonons in Crystals and Nanomaterials - Progress in Modeling and Experimental Techniques' dedicated to Professor Krzysztof Parliński to celebrate 50 years of his scientific work, Kraków 2012
9. E.Lalik "Noble Gas-induced Oscillatory Kinetics in Pd/Hydrogen System", (lecture), 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
10. B.Sulikowski "Impact of Solid State NMR on Physicochemistry of Zeolites and Heteropolyacids", 44th Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków 2012
11. R.Tokarz-Sobieraj, P.Niemiec "Metoda DFT jako narzędzie opisu struktury elektronowej modyfikowanych heteropolikwasów", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
12. P.Warszyński "Multilayer Functional Coatings: Thin Films and Microcapsules", Congr. Material Science and Technology, Darmstadt 2012
13. P.Warszyński, L.Szyk-Warszyńska, M.Kolasińska-Sojka, M.Elźbiaciak-Wodka, K.Szczepanowicz, K.Kilan, T.Kruk "Designing Novel Materials for Nanodevices: From Theory to Practice", 3rd Annual Meeting NanoTP 2012, Berlin 2012

REFERATY I KOMUNIKATY

1. P.Batys, P.Weroński "Numerical Studies of Self-assembled Multilayers", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
2. E.Bielańska, J.Camra, J.Dutkiewicz, P.Kornelak, M.Najbar, A.Wesełucha Birczyńska, T.Wilkosz "Oxidation of Acid-proof Steel Foil as a Method of Deposition of Phases Active in Nitrogen Oxides Decomposition on Metallic Monolith Walls", Int. Conf. Engineering Materials ICEM 2012, Singapore 2012
3. Ł.Bratasz "Allowable Microclimatic Variations in Museums and Historic Buildings", Conf. Climate for Collections: Standards and Uncertainties, Munchen 2012
4. A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk, P.Dąbrowska, M.Nattich-Rak "Determining Mechanism of Fibrinogen Adsorption at Solid/Liquid Interfaces", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
5. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk "Electrokinetic Studies of HSA Adsorption", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
6. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk "Mechanisms of Protein Adsorption Determined by AFM, SPS and Streaming Potential Measurements",
7. P.Dąbrowska, Z.Adamczyk, A.Bratak-Skicki "Fibrinogen Monolayers on Latex Particles - Microelectrophoretic Studies", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
8. A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, A.A.Umińska, M.Witko "Mechanizm katalitycznego i niekatalitycznego utleniania cykloheksenu - Badania metodą DFT", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
9. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic Degradation of the Organic Contaminants Enhanced by Oxidant", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
10. J.Dziedzic, P.Nowak, P.Warszyński "Photocatalytic Degradation of the Organic Compounds Enhanced by Chemical Oxidants", Europejska Letnia Szkoła Fotowoltaiki, Kraków 2012
11. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Transformations of alpha-Pinene over Dealuminated Natural Clinoptilolite", 19th Zeolite Forum, Małe Ciche 2012
12. B.Gil, B.Marszałek, A.Micek-Ilnicka, N.Reimer, N.Stock "Post-synthetic Modification of Coordination Networks", 44th Symp. on Catalysis, Prague 2012
13. M.Grzesiak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania nowych związków strontu z kwasami dikarboksyłowymi", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012

14. J.Handzlik, J.Kuźmińska, R.Gryboś, F.Tielens "Monomeric Cr(VI) Oxide Species Supported on Amorphous SiO₂ and AlO_x/SiO₂ - Cluster and Periodic DFT Studies", 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012
15. E.Jarek, M.Krzan, L.Szyk-Warszyńska, M.Orlof, K.Czapla, B.Korochwiec, P.Warszyński, K.Małyśa, E.Rogalska, "Monitoring of Enzymatic Hydrolysis of Phospholipids at Solid/Liquid and Air/Water Interfaces by Dynamic Surfaces Activity of Its Products", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
16. M.Kolasińska-Sojka, G.Potasiewicz, A.Pajor-Swierzy, P.Warszyński "Electroactive Properties of the Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", 14th Int. Conf. Organized Molecular Films ICOMF14, Paris 2012
17. D.Kosior, J.Zawała, M.Krasowska, K.Małyśa "On the Mechanism of the Action of Frothers in the Colliding Bubble Attachment to Hydrophobic Surfaces of Different Roughness", 26th Int. Mineral Processing Congr. IMPC 2012, New Delhi 2012
18. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of the Surface Active Substances on the Bubble Impact Velocity, Bouncing and the Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Solid Surfaces", 5th International Workshop "Bubble and Drop Interfaces", 20-24.05.2012 Krakow, Poland.
19. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Effect of the Frother Overdosage on Kinetics of the Three-Phase Contact Formation at Hydrophobic Surfaces", 19th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS2012, Edmonton 2012
20. D.Kosior, J.Zawała, K.Małyśa "Influence of the Impact Velocity on Stability of the Foam Films Formed by the Rising Bubbles", 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012
21. A.Kowal, R.R.Adzic, M.Mosiąlek, G.Modarski, M.Kopczyk "Catalysts for Ethanol Oxidation in Ethanol Solid Oxide Fuel Cells (ESOFC)", Energy & Materials Research Conf. EMR 2012, Torremolinos 2012
22. A.Kowal, R.R.Adzic, M.Mosiąlek, G.Mordarski, M.Kopczyk "Czysta energia z etanolu (synteza i własności katalizatorów do utleniania etanolu w ogniwach paliwowych)", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
23. R.Kozłowski "Restoration of Facades Based on Roman Cement Technology", Info-day 'Roman cement - history, properties, application possibilities', Freiburg 2012
24. R.Kozłowski "Zaprawy romańskie: mechanizm wiązania, właściwości, problemy konserwatorskie", Sesja Konserwatorska 'Cement romański w konserwacji zabytków', Zamek Królewski, Warszawa 2012
25. T.Kruk, K.Szczepanowicz, L.Szyk-Warszyńska, J.Stefańska, P.Warszyński "Multifunkcyjne wielowarstwowe powłoki polimerowe", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012

26. M.Krzan "Automatic and Direct Investigation of Bubble Motion in Aqueous Surfactant Solutions by Using Digital Image Processing Techniques", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
27. M.Krzan "Rheology of the Wet Surfactant Foams and Biofoams - a Review", 3. Krakowskie Warsztaty Reologiczne, Kraków 2012
28. M.Krzan, H.Caps, N.Vandewalle "High Stability of the Bovine Serum Albumine Foams Evidenced in Hele-Shaw Cell", 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012
29. M.Krzan, P.Zychowska, J.Zawała, K.Małyś "Monitoring of Waters Pollution by Measurements the Bubble Velocity Variations", 19th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS2012, Edmonton 2012
30. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Silver Nanoparticles Deposition", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
31. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Adamczyk "Characteristic of KfrA Protein via AFM and Electrokinetics Measurements" 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
32. W.Łasocha, A.Szymańska, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Synthesis and Crystal Structure of Few New Decavanadates", 27th European Crystallographic Meeting, Bergen 2012
33. M.Łukomski, J.Czop, M.Strojecki, Ł.Bratasz "Acoustic Emission Monitoring: on the Path to Rational Strategies for Collection Care", Conf. Climate for Collections: Standards and Uncertainties, Munchen 2012
34. M.Łukomski, M.Strojecki, Ł.Bratasz "Emisja Akustyczna jako narzędzie do planowania strategii zarządzania klimatem w muzeum", Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie zabytków', Warszawa 2012
35. J.Matusik, M.Zimowska, T.Bajda "Modified Kaolinites and Halloysite with Anion Sorption Properties", 6th Mid-European Clay Conf.MECC'12, Prague 2012
36. A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Carbon Nanotubes as the Support for Heteropolyacid Catalysts", 19th Zeolite Forum, Mała Ciche 2012
37. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetyka osadzania fluorescencyjnych cząstek lateksowych na monowarstwach polielektrolitów", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
38. E.Młyńczak, J.Gurgul, N.Spiridis, J.Korecki "Exchange Bias in Fe/CoO(001) and Fe/CoO(111) Bilayers", Joint European Magnetic Symp. JEMS 2012, Parma 2012
39. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Hematite Nanoparticle Monolayers - Streaming Potential Measurements", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012

40. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Charakterystyka monowarstw nanocząstek hematytu na powierzchni miki w warunkach in situ metodą potencjału przepływu", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
41. M.Nosek, P.Weroński "Application of Electrochemical Techniques to Study Colloidal Films", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
42. P.Nowak, A.Węgrzynowicz, K.Jakubiec, T.Chmielewski "Pyrite Oxidation and Inhibition by Certain Chemicals in Relation to the Problem of Acidity Generation in Acid Sulfate Soils", 7th Int. Acid Sulfate Soil Conf., Espoo 2012
43. M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Mechanizmy adsorpcji oraz uwalniania nanocząstek srebra z powierzchni heterogenicznych", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
44. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, D.Synowiec, K.Małek "Synthesis of Silver Nanoparticles Suspension- SERS and other Applications", 7th Scientific Workshop for Postgraduate Students "Interfacial Phenomena in Theory and Practice" VII SUDOMIE 2012, Rybaki 2012
45. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Zeolite Precursors Based Layer Materials - New Catalysts for the Liquid Phase Reactions", 11th Pannonian Int. Symp. on Catalysis, Obergurgl 2012
46. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Catalytic Properties of New Laminar Materials Based on Nanoparticles of Zeolites", 19th Zeolite Forum, Małe Ciche 2012
47. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Zeolite Seeds Precursors Incorporated in the Mesoporous Framework: Physicochemical and Catalytic Properties", 2. Warsztaty Naukowe ISD, Ochotnica Dolna 2012
48. A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka, P.Warszyński "The Influence of Conductive Polyelectrolytes on the Formation of Electroactive Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012
49. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "Electroactive Multilayer Films of Polyelectrolytes and Prussian Blue Nanoparticles as a Sensitive Tool for H₂O₂ Detection", 1st Scientific Workshop of ISD Study, Zakopane 2012
50. H.Pálková, L.Jankovič, V.Hronský, M.Zimowska, J.Madejová "Effect of Acid Treatment on the Organo-montmorillonite Structure", 6th Mid-European Clay Conf.MECC'12, Prague 2012
51. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Jóźwiak "Interactions between Fenoterol and beta2-Adrenergic Receptor: the Stereoselective Binding and the Ligand Association/Dissociation Profiles", 5th Conversatory on Medicinal Chemistry, Lublin 2012
52. W.Płaziński, M.Drach "Calcium Binding by Alginates. Insight into the Molecular Details of the Process Dynamics", 6th Pacific Basin Conf. Adsorption Science and Technology, Taipei 2012

53. W. Płaziński, M. Drach "Calcium Binding by Alginates. Exploring the Free Energy Landscapes by the Transition Path Sampling Method", 22nd Int. Conf. Chemical Thermodynamics, Buzios 2012
54. W. Płaziński, A. Knyś-Dzieciuch "The 'Order-to-Disorder' Conformational Transition in CD44 Protein: an Umbrella Sampling Analysis", 5th Conservatory on Medicinal Chemistry, Lublin 2012
55. M. Radoń, E. Brocławik, K. Pierloot "Spin State Energetics of Heme-Related Models from DFT and ab initio Calculations", CECAM Conf. Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry, Saragossa 2012
56. D. Rutkowska-Żbik, T. Korona "Możliwości kompleksowania porfiryny magnezu – badania metodą rachunku zaburzeń o adaptowanej symetrii", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
57. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Alternatywna technologia przeróbki metanu: aromatyzacja na katalizatorze MoO₃/ZSM-5. Opis fazy aktywnej i mechanizmu reakcji", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
58. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Transmetallation of Porphyrins: DFT Mechanistic Studies", 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012
59. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Theoretical Modeling of Chlorophylls and Their Derivatives as Potential Therapeutic Agents", Conf. Modeling & Design of Molecular Materials 2012, Wrocław 2012
60. R. Socha, M. Szczepanik-Ciba, B. Strzelczyk, E. Madej, B. Figarska, N. Spiridis, J. Korecki "Epitaxial Layers of Mixed Iron Manganese Oxides: Surface Properties and Reactivity", 16th Int. Conf. Solid Films and Surfaces, Genoa 2012
61. R.P. Socha, M. Zimowska, L. Matachowski, J. Gurgul, D. Mucha, J. Dziejczak "Silver Nanostructures Grown on Heteropolyacid Salts", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
62. B. Sulikowski, D. Szepietowska "Solid-state NMR Studies of Ultrastable Zeolite Y", 19th Zeolite Forum, Małe Ciche 2012
63. M. Szaleniec, A. Dudzik, M. Tataruch, K. Szymańska, A. Jarzębski, J. Bryjak, M. Witko "Zastosowanie dehydrogenazy (S)-1-fenyl-etanolowej do syntezy chiralnych alkoholi drugorzędowych", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
64. M. Szaleniec, A. Dudzik, M. Tataruch, M. Witko, D. Knack, J. Heider "Enantioselective Hydroxylation by Ethylbenzene Dehydrogenase - Origins of Enantioselectivity", 6th Int. Congr. Biocatalysis BIOCAT 2012, Hamburg 2012
65. K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules with Liquid Core: Their Application in Nanomedicine", 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012

66. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, J.Piekoszewska, R.P.Socha, P.Warszyński "PLL/Casein and PLAr/Casein Multilayer Films- formation and stability", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
67. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, P.Warszyński "Bild-up of poly-L-Arginine/Casein Multilayer Films on Solid Substrates", COST CM1101 Workshop Nano-biocolloidal materials and non-equilibrium self-assembly, Barcelona 2012
68. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, T.Ślęzak, R.Zdyb, N.Spiridis, C.Quitmann, J.Raabe, J.Korecki, "Magnetic Properties of Fe Nanostructures on W(110) Studied with PEEM", 8th Int. Workshop on LEEM/PEEM, Hong Kong 2012
69. M.Tataruch, M.Szaleniec, J.Bryjak, K.Szymańska, A.Dudzik, J.Opalinska-Piskorz, M.Witko, A.Jarzębski, E.Luchter-Wasylewska, J.Heider "Immobilizowane dehydrogenazy etylobenzenowa i fenyloetanolowa jako narzędzia do biosyntezy chiralnie czystych składowych leków" 3. Ogólnopolskie Symp. Nowoczesne Techniki Badawcze w Ocenie Jakości Produktów Leczniczych, Lublin 2012
70. R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, D.Rutkowska-Żbik, P.Niemiec, M.Witko "Electronic Structure of Model Heteropolyacids and their Salts. Cluster and Periodic DFT Study", 15th Int. Congr. Catalysis, Munchen 2012
71. P.Warszyński, P.Dyshlovenko, Ph.Dejardin "Electrostatic Interaction between Spherical Particles with Dipolar Charge Distribution and a Charged Surface", COST CM1101 Workshop Discussion on Hydration Forces, Sofia 2012
72. P.Warszyński, M.Elżbięciak-Wodka, A.Pajor-Świerzy, M.Kolasińska-Sojka "Elektrochemical Probing of Polyelectrolyte Multilayers", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
73. J.Zawała, T.Dąbroś "Settling Properties of Aggregates in Paraffinic Bitumen Froth Treatment", 19th Int. Symp. Surfactants in Solution SIS2012, Edmonton 2012
74. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, K.Pamin, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "The Effect of Alumination Process on Surface Acidity of PCH Structures Derived from Laponite", 6th Mid-European Clay Conf.MECC'12, Prague 2012
75. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, K.Pamin, Z.Olejniczak, E.M.Serwicka "Acid Properties of Laponite-derived Porous Clay Heterostructures Modified by Doping with Aluminium", 19th Zeolite Forum, Maë Ciche 2012

POSTERY

1. M.Adamczak, G.Para, C.Simon, P.Warszyński "Natural Oil Nanoemulsions as Cores for Layer-by-Layer Encapsulation", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
2. M.Adamczak, G.Para, C.Simon, P.Warszyński "Layer-by-Layer Encapsulation of Natural Oil Emulsion Droplets", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012

3. Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska, M.Wasilewska "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption Revealed by AFM, Streaming Potential and Colloid Enhancement" Int. Conf. NanoStructured Materials NANO2012, Rhodes 2012
4. Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Sadowska "Formation and Detection of Fibrinogen Films on Mica", Conf. NANOFORMULATION 2012, Barcelona 2012
5. Z.Adamczyk, M.Wasilewska, M.Nattich-Rak, M.Sadowska "Mechanizm oddziaływań fibrynowego z powierzchniami i cząsteczkami", Konf. 60-lecia Polskiej Akademii Nauk, Warszawa 2012
6. K. Bahranowski, A.Gaweł, A.Klimek, T.Machej, J.Matusik, A.Michalik-Zym, E.M.Serwicka, E. Wisła-Walsh, W. Włodarczyk "Pillared Montmorillonites as Catalysts for Removal of Chlorinated Volatile Organic Compounds from Air. Structural Characterization", 6th Mid-European Clay Conf.MECC'12, Prague 2012
7. K.Balin, A.Nowak, J.Szade, M.Wojtyniak, J.Korecki, M.Ślęzak, D.Wilgocka-Ślęzak, T.Giela, Ch.Quitmann, J.Raabe, Z.Celinski "Nanostructures in MBE Grown {Eu-Fe} Films", 8th European Workshop on Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS Europe 2012, Münster 2012
8. J.Barbasz, M.Cieśla, A.Michna "Adsorption on Fractal Collectors", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
9. P.Batys, P.Weroński "Model Surfaces of Controlled Roughness", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
10. A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk, P.Dąbrowska "Electrokinetic Studies of Protein Adsorption on Latex Particles", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
11. A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk, P.Dąbrowska "Physicochemical Background of the Colloid Enhancement Method for Protein Monolayer Detection at Solid/Electrolyte Interfaces", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
12. A.Bratak-Skicki, Z.Adamczyk, P.Dąbrowska, M.Nattich-Rak "Determining Mechanisms of Protein Adsorption via AFM, Electrokinetic Measurements and Colloid Enhancement", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
13. E.Broclawik, P.Kozyra, M.Mitoraj, J.Datka "Multiple Bond Activation by Coinage Metal Cations in Zeolites: Quantitative Charge Transfer Resolution", 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012
14. M.Cieśla, J.Barbasz "Ordering in Fibrinogen Layer", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
15. M.Cieśla, J.Barbasz "Modeling of an Interacting Dimers Adsorption", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012

16. M.Dąbkowska, Z.Adamczyk, M.Morga "Mechanism of Proteins and Colloids Adsorption: Streaming Potential, AFM and XPS Study", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
17. M.Dąbkowska, M.Kujda, Z.Adamczyk "Mechanisms of HSA Adsorption on Mica: Electrokinetic Studies", 22nd IUBMB & 37th FEBS Congr. "From Single Molecules to Systems Biology", Sevilla 2012
18. P.Dąbrowska, Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki "Fibrinogen Adsorption on Latex Particles - Electrokinetic Studies", 4th US-Poland Workshop Interfacial Phenomena at the Nanoscale: Fluids and Soft Matter, Poznan 2012
19. P.Dąbrowska, Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki "Determining Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Latex Particle", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
20. P.Dąbrowska, Z.Adamczyk, A.Brateg-Skicki, M.Nattich-Rak "Electrokinetic Studies of Protein Adsorption on Latex Particles "Electrokinetic Studies of Protein Adsorption on Latex Particles", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
21. M.Derewiński, P.Sarv "1H, 27Al and 31P MAS NMR Study of Phosphorous Modified HZSM-5 Zeolite", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
22. A.Drelinkiewicz, Ż.Kalemba, E.Lalik, E.Bielańska "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów polimerowych bazujących na solach polianiliny", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
23. A.Drelinkiewicz, R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, E. Bielańska "Synteza nośnikowych katalizatorów palladowych metodą mikroemulsji water-in-oil. Wpływ właściwości nośników", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
24. A.Drzewiecka-Matuszek, A.Dudzik, M.Tataruch, M.Szaleniec, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Alternatywny mechanizm reakcji utleniania alkilowych fenoli i anilin przez dehydrogenazę etylobenzenową", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
25. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Oszajca, A.Franke, M.Brindell, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, G.Stochel, R.van Eldik, "The Influence of N-Methylimidazole as Axial Ligand in the Water-soluble Iron(III) Porphyrin on the Formation of Fe(IV)-Oxo Species. A cCombined Experimental and Theoretical Study", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
26. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Szaleniec, T.Borowski, D.Knack, M.Witko, J.Heider "Prediction of Enzyme Activity with Quantum Chemical Modeling. Case Study of Ethylbenzene Dehydrogenase Reactivity", 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012
27. A.Drzewiecka-Matuszek, M.Szaleniec, P.Hejduk, M.Witko "DFT Modeling of Ammonia Adsorption on Low Index V₂O₅ Surfaces", 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012

28. M.Dudek, A.Rapacz-Kmita, R.P.Socha, M.Mosiąlek, M.Gajek "Utilization of Carbide Vanadium Particles in Fuel Cell Technology", 3rd International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
29. A.Dudzik, M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider, P.Borowiecki "Enantioselective Reduction of Carbonyl Compounds by (S)-1-Phenylethanol Dehydrogenase", 6th Int. Congr. Biocatalysis BIOCAT 2012, Hamburg 2012
30. A.Dudzik, M.Szaleniec, M.Witko, J.Heider, P.Borowiecki "(S)-Phenylethanol Dehydrogenase as a Catalyst in Prochiral Ketones and β -keto Esters Reduction", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
31. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.Bielańska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Wpływ składu chemicznego mieszanek tlenków otrzymanych z prekursorów typu hydrotalkitu $M(II)_{4-x-y}Mn_4AlZr_xCe_yCO_3$ ($M(II)=Cu, Co; x=0;0,5; y=0;0,1$) na aktywność w reakcji całkowitego spalania toluenu", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
32. R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, E.Bielańska, T.Machej, Ł.Mokrzycki, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Hydrotalcite-derived Cu-Mn-Al and Co-Mn-Al Mixed Oxide Catalysts for Total Oxidation of Toluene: the Role of Ce and Zr Additives"; 6th Mid-European Clay Conf.MECC'12, Prague 2012
33. D.Duraczyńska, E.M.Serwicka, A.Drelinkiewicz, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, R.Socha, M.Zimowska, Z.Olejniczak "Ograniczenia nanoprzestrzenne w kanałach mezoporowatego nośnika jako czynnik warunkujący aktywność katalityczną organometalicznego centrum aktywnego", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
34. J.Dziedzic, K.Szczepanowicz, P.Nowak, P.Warszyński "Synergistic Effect of the Oxidant and TiO_2 Photocatalyst in the Process of Humic Substances Removal from Water", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
35. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Catalytic Properties of Modified, Natural Clinoptilolite", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
36. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "Natural Zeolites as Catalysts for Terpene Transformations", 3rd Conf. Impact of Young Scientists on the Achievements of Science in Poland, Kraków 2012
37. A.Dziedzicka, B.Sulikowski "How Dealumination Affects Physico-chemical Properties of Natural Clinoptilolite", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
38. M.Elżbięciak-Wodka, P.Nowak, P. Warszyński "Resistance, Stability and Relaxation Time of Model Multilayer Films Depending on the Ionic Strength", 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012
39. B.Figarska, E.Madej, N.Spiridis, R.P.Socha, J.Korecki "Badania struktury i stanów elektronowych epitaksjalnych warstw tlenku manganu (II) na W(100)", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

40. B.Figarska, E.Madej, N.Spiridis, R.P.Socha, J.Korecki "The Studies of Structure and Electronic States of Epitaxial Manganese (II) Oxide on W(100)", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
41. U.Filek, A.Lubańska, B.Sulikowski "In situ Infrared Studies of the Thermal Decomposition of 12-Molybdophosphoric Heteropolycompounds", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
42. U.Filek, R.P.Socha, E.Bielańska, A.Bielański "Pd/H₆P₂W₁₈O₆₂ as the Bifunctional Catalyst for Ethanol Conversion", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
43. U.Filek, R.P. Socha, E.Bielańska, A.Bielański " Pd/H₆P₂W₁₈O₆₂ jako katalizator bifunkcyjny konwersji alkoholu etylowego", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
44. K.Freindl, M.Zajac, E.Partyka-Jankowska, W.Karaś, N.Spiridis, M.Ślęzak, T.Ślęzak, J.Korecki "Oxygen Adsorption on Fe Monolayer on W(110)", 16th Int. Conf. Solid Films and Surfaces, Genoa 2012
45. M.Gackowski, E.Bielańska, M.Derewiński "Osadzanie nanocząstek zeolitu typu MFI w makroporach monolitów krzemionkowych", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
46. B.Gil, A.Micek-Ilnicka, A.Bielański "Heteropolyacid Encapsulated in MOF Materials as Effective Ethanol Conversion Catalysts", 6th Int. Workshop Characterization of Porous Materials: from Angstroms to Millimeters, Delray Beach 2012
47. M.Góra, M.Sadowska, B.Kozik, D.Dronka-Góra, J.Gołaszewski, M.Łuczyński, E.Olba-Zięty, M.Nattich-Rak "Studies on Influence of Phosphates-surfactants Systems on Cellulose Surface Properties", 4th Nordic Wood Biorefinery Conf., Helsinki 2012
48. M.Góra, M.Sadowska, B.Kozik, D.Dronka-Góra, J.Gołaszewski, M.Łuczyński, E.Olba-Zięty, M.Nattich-Rak "Studies on Influence of Phosphates-surfactants Systems on Cellulose Surface Properties", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
49. M.Góral, R.Kosydar, A.Król, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Selektywne uwodornianie 2-butynu-1,4-diolu w obecności katalizatorów Pd/poli(4-winylopirydyna)", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
50. M.Grzesiak, W.Łasocha, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha "Badania strukturalne związków strontu z kwasami dikarboksyłowymi", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
51. J.Gurgul, M.Szczepanik-Ciba, R.Socha, E.Madej, J.Przewoźnik, B.Figarska, N.Spiridis, J.Korecki "Electronic and Magnetic Properties of the Fe/MnO(100) Interface", 16th Int. Conf. Solid Films and Surfaces, Genoa 2012
52. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Adsorption of Bovine Serum Albumin (BSA) on Silica Surface Investigated by the Quartz Crystal Microbalance (QCM) and Contact Angle Measurements", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012

53. B.Jachimska, A.Kozłowska "Behavior of Hyperbranched Polyethylene Imine (PEI) Investigated by the Quartz Crystal Microbalance (QCM) and Atomic Force Microscope (AFM) Measurements", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
54. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Structure of Adsorbed 6th Generation Poly(amidoamine) PAMAM Dendrimers Investigated by the Quartz Crystal Microbalance (QCM)", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
55. B.Jachimska, A.Kozłowska "Protonation of Lysozyme and Its Consequences for the Adsorption onto a Mica Surface", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
56. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Wyznaczanie struktury 6-tej generacji dendrymerów poliamido-aminowych (PAMAM) za pomocą mikrowagi kwarcowej", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
57. B.Jachimska, M.Łapczyńska "Badanie kinetyki adsorpcji surowiczej albuminy wołowej (BSA) na modelowej powierzchni krzemu z zastosowaniem mikrowagi kwarcowej oraz pomiarów kąta zwilżania", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
58. A.Jamrozik, J.Przewoźnik, M.Mazurkiewicz, A.Małolepszy, L.Stobiński, K.Matlak, J.Korecki, K.J.Kurzydłowski, K.Burda, "Investigation of Functionalized Multi-wall Carbon Nanotubes Properties", Int. Conf. Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials NANOSMAT, Prague 2012
59. K.Jamroży, M.Nattich-Rak, D.Dronka-Góra, M.Góra, B.Kozik, M.Łuczyński, E.Bieleńska "Wpływ soli nieorganicznych i surfaktantów na degradację celulozy w warunkach hydrodynamicznych", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
60. E.Jamróz, G.Para, B.Jachimska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński, A.Para "Albumin-Furcellarane Complexes as Cores for Nanoencapsulation", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
61. E.Jamróz, K.Szczepanowicz, G.Para, B.Jachimska, P.Warszyński, A.Para, "Protein-Furcellarane Complexes for Nanocapsule Formation", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
62. E.Jamróz, K.Szczepanowicz, G.Para, B.Jachimska, P.Warszyński, A.Para "Furcelleran-Albumine Complex Formation", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
63. Ż.Kalemba, E.Lalik, A.Drelinkiewicz "Transestryfikacja triglicerydów metanolem w obecności katalizatorów polimerowych bazujących na solach polianiliny", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
64. Ż.Kalemba, E.Lalik, A.Drelinkiewicz, E.Bieleńska "Nanorurki węglowe jako nośnik dla katalizatorów aktywnych w procesie wytwarzania bioestrów", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012

65. M.Kamińska, M.Woch, E.Bielańska, A.Kowal "Synthesis and Morphology of CuO Nanoparticles Produced by Simple Wet Chemical Method", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
66. R.Karcz, R.Dula, A.Michalik-Zym, B.Napruszewska, K.Pamin, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Wpływ położenia kobaltu w heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną w reakcji utleniania fenolu diocetanem jodozobenzenu", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
67. R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz, M.Szaleniec, E.M.Serwicka "Wpływ temperatury reakcji na selektywność reakcji utleniania cykloheksenu w obecności lakunarnych anionów Keggina modyfikowanych kobaltem", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
68. H.Kazimierzczak, P.Ozga, R.P.Socha "Investigation of Electrochemical Co-deposition of Zinc and Molybdenum from Citrate Solutions", 3rd International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
69. K.Kilan, L.Szyk-Warszyńska, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Multilayer Polymer Films as Functional Membranes and Coatings for Nanocapsules in Application for Molecular Biomedicine", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
70. A.Klisińska-Kopacz, M.Strojecki, M.Obarzanowski, Ł.Bratasz "Badania procesów krystalizacji soli w zespole piwnic Pałacu biskupa Erazma Ciołka" Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie zabytków', Warszawa 2012
71. D.Knack. C.Hagel. M.Szaleniec. A.Dudzik. A.Salwinski, J.Heider "Application Potential of Ethylbenzene Dehydrogenase for Hydroxylation of Aromatic Hydrocarbons to Chiral Alcohols", 6th Int. Congr. Biocatalysis BIOCAT 2012, Hamburg 2012
72. A.Kolak, M.Niemczyk-Wrzeszcz, M.Zimowska, P.Kuśtrowski, P.Michorczyk "Synteza, charakterystyka fizykochemiczna i właściwości katalityczne tlenków otrzymanych na drodze nanoreplikacji", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
73. J.Koperski, T.Urbańczyk, M.Strojecki "Towards Realization of the E-P-R Experiment for Atoms Created via Molecular Dissociation in Pulsed Supersonic Beam", 24th Int. Conf. Atomic Physics ICAP2012, Palaiseau 2012
74. D.Kosior, R.Todorov, D.Exerowa, K.Małyśa "Properties of n-Octanol Stabilized Thin Liquid Films under Static and Dynamic (Colliding Bubble) Conditions", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
75. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, E.Bielańska, A.Drelinkiewicz "Water-in-Oil Microemulsion Method for Preparation of Pd- size Controlled Catalysts", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
76. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Synteza nośnikowych katalizatorów palladowych metodą mikroemulsji „water-in-oil. Wpływ właściwości nośników", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

77. R.Kosydar, M.Góral, J.Gurgul, A.Drelinkiewicz "Synteza nośnikowych katalizatorów palladowych metodą mikroemulsji „water-in-oil. Wpływ właściwości nośników", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
78. M.Kozieł, W.Nitek, W.Łasocha "Badania strukturalne soli Li i Rb oraz alifatycznych kwasów dikarboksylowych", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
79. M.Kozieł, M.Oszajca, A.Rafalska-Łasocha, E.Nosek, W.Łasocha "XRPD Investigations of the Ancient Coins and Other Metal Objects", 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Anniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Kraków 2012
80. M.Kozieł, M.Oszajca, A.Rafalska-Łasocha, E.Nosek, W.Łasocha, M.Grzesiak "Badania XRPD zabytkowych monet oraz innych metalowych przedmiotów", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
81. A.Kozioł-Rachwał, K.Matlak, M.Ślęzak, T.Ślęzak, K.Freindl, N.Spiridis, D.Wilgocka-Ślęzak, M.Zajac, J.Korecki "Perpendicular Magnetic Anisotropy in Epitaxial Fe/MgO Multilayers", Joint European Magnetic Symp. JEMS 2012, Parma 2012
82. A.Kozłowska, B.Jachimiska "Protonowanie lizozymu, a proces adsorpcji na powierzchni miki", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
83. A.Kozłowska, B.Jachimiska "Badanie właściwości rozgałęzionej polietylenoiminy (PEI) za pomocą mikrowagi kwarcowej z monitorowaniem dyssypacji (QCM-D)", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
84. P.Kozyra, M.Radon, J.Datka, E.Broclawik "Electronic Channels of a Molecule Activation by the Catalytic Site - NO at the Copper Site in a Zeolite", 15th Int. Congr. Catalysis, Munchen 2012
85. P.Kozyra, M.Radoń, J.Datka, E.Broclawik "Spin Resolved Charge Flow Analysis of a Molecule Activation by the Catalytic Site: NO at the Copper Site in a Zeolite", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
86. P.Kozyra, M.Radoń, J.Datka, A.Stępniewski, E.Broclawik "Kanały przepływu elektronów a aktywacja cząsteczki NO na centrum miedzi(I) w zeolicie", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
87. M.Krzak, K.Szczepanowicz, K.Podgórna, G.Mordarski, L.Szyk-Warszyńska, P.Nowak, P.Warszyński "Fluorescence Microscopy and Electrochemical Study of the Interaction of Polyelectrolyte Capsules Containing Anticorrosive Agents with AA2024 Alloy Surface", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
88. M.Krzak, K.Szczepanowicz, K.Podgórna, G.Mordarski, P.Nowak, P.Warszyński "The Influence of the Encapsulated Anti-corrosion Agents on the Corrosion Resistance of AA2014 Alloy", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

89. M.Krzak, Z.Tabor, P.Nowak, P.Warszyński, "Investigation of Water Diffusion process in Composite Anticorrosive Epoxy Coatings", World Forum on Advanced Materials POLYCHAR 20, Dubrovnik 2012
90. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, E.Rogalska "Fast Method for Detection of Water Soluble Surface-Active Products of Enzymatic Reaction by Monitoring of the Bubble Velocity Variations", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
91. M.Krzan, E.Jarek, P.Warszyński, E.Rogalska "Fast Method for Detection of Water Soluble Surface-Active Products of Enzymatic Reaction by Monitoring of the Bubble Velocity Variations", 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012
92. M.Krzan, K.Małyś "Effect of the Surfactant Polar Group on the Bubble Rising Velocity", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
93. M.Krzan, P.Zychowska, J.Zawała, K.Małyś "Monitoring of Waters Pollution by Measurements the Bubble Velocity Variations", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
94. T.Kruk, K.Szczepanowicz, P.Warszyński "Polyelectrolyte Multilayer Thin Films with Antimicrobial Properties", 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012
95. K.Kubiak, Z.Adamczyk "Characterization of Silver Nanoparticles" 4th US-Poland Workshop Interfacial Phenomena at the Nanoscale: Fluids and Soft Matter, Poznan 2012
96. K.Kubiak, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Properties of Silver Nanoparticle Monolayers via Controlled Adsorption-Desorption Processes", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
97. M.Kujda, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, M.Warsińska, G.Jagura-Burdzy, M.Adamczyk "KfrA Protein of 751 Plasmid Study by DLS, Microelectrophoresis and AFM Methods", 22nd IUBMB & 37th FEBS Congr. "From Single Molecules to Systems Biology", 4th Sevilla 2012
98. I.Kumakiri, P.Nowak "Application of Catalytic Membrane Contactors for Water Treatment", 77th Annual Meeting Soc. Chem. Eng., Tokyo 2012
99. E.Lalik, M.Góral "An Empirical Dependence of Frequency in the Oscillatory Sorption of H₂ and D₂ in Pd on the First Ionization Potential of Noble Gases (He, Ne, Ar, Kr) and N₂", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
100. E.Lalik, D.Vujadinovic, M.Oćwieja, A.Martyła, A.Kowal "Sustained Oscillations on Pd Nanoparticles", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
101. K.Luberda-Durnaś, W.Łasocha "Organiczno-nieorganiczne związki warstwowe", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

102. K.Luberda-Durnaś, P.Sanz Camacho, W.Łasocha "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne prekursorzy półprzewodników typu II-IV".54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
103. K.Luberda-Durnaś, P.Sanz Camacho, W.Łasocha "Organiczno-nieorganiczne związki warstwowe", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
104. A.Martyła, E.Bieleńska, F.Soita Jumbe, P.Handzlik, A.Kowal "Morphology of Minerals from Kilimanjaro Region", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
105. L.Matachowski, J.Gurgul, M.Zimowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha "Stabilność termiczna soli heteropolikwasu $H_3PW_{12}O_{40}$ podstawionego jednowartościowymi kationami Na^+ , K^+ , Cs^+ i Ag^+ ", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
106. L.Matachowski, M.Zimowska, W.Rojek, T.Machej, J.Gurgul, R.Socha, D.Mucha "Dehydratacja n-butanolu na $H_3PMo_{12}O_{40}$ i $Ag_3PMo_{12}O_{40}$ w obecności powietrza", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
107. A.Micek-Ilnicka, E.Bieleńska, A.Bieleński "Nanorurki węglowe jako nośnik heteropolikwasów katalizujących konwersję alkoholu etylowego", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
108. A.Michalik-Zym, E.Bieleńska, R.Dula, D.Mucha, B.D.Napruszewska, E.M.Serwicka, M.Zimowska, "Wpływ wybranych parametrów syntezy na właściwości fizykochemiczne mieszanych tlenków CuMnAl otrzymanych z prekursorów hydrotalkitowych", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
109. A.Michalik-Zym, E.Bieleńska, R.Dula, D.Mucha, B.D.Napruszewska, M.Zimowska, E.M.Serwicka "Influence of Selected Synthesis Parameters on the Physicochemical Properties of Hydrotalcite-derived Cu-Mn-Al Mixed Oxides", 6th Mid-European Clay Conf.MECC'12, Prague 2012
110. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetyka osadzania fluorescencyjnych cząstek lateksowych na monowarstwach polielektrolitów", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
111. A.Michna, Z.Adamczyk, K.Jamroży "Kinetics of Particle Deposition Studied by Fluorescent Imaging and Streaming Potential Measurements", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
112. A.Michna, M.Cieśla, J.Barbasz "Adsorption of Colloid Particles Mixtures at Interface", 10th Conf. Colloid Chemistry, Budapest 2012
113. A.Michna, M.Cieśla, J.Barbasz "Proces osadzania bimodalnej zawiesiny koloidalnej na powierzchni międzyfazowej", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
114. A.Mińczewska, E.Broclawik, T.Borowski "DFT Study on the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase", Conf Challenges in Biomolecular Modeling - from QM to Coarse-Graining, Stockholm 2012

115. A.Mińczewska, E.Broclawik, T.Borowski "DFT Study on the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase", 11th European Biological Inorganic Chemistry Conf., Granada 2012
116. A.Mińczewska, E.Broclawik, T.Borowski "DFT Study on the Mechanism of the Catalytic Reaction of (S)-2-Hydroxypropylphosphonic Acid Epoxidase", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
117. A.Mińczewska, M.Chruszcz, P.Porębski, K.Tkaczuk, W.Minor, T.Borowski "5-Methylthio-3-oxo-1-penten-1,2-diol Dioxygenase - Studies on the Structure and Function of the Metalloenzyme", 11th European Biological Inorganic Chemistry Conf., Granada 2012
118. A.Mińczewska, M.Chruszcz, P.Porębski, K.Tkaczuk, W.Minor, T.Borowski "5-Methylthio-3-oxo-1-penten-1,2-diol Dioxygenase - Studies on the Structure and Function of the Metalloenzyme", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
119. A.Mińczewska, A.Wójcik, E.Broclawik, T.Borowski "Modelling Reaction Mechanisms of Nonheme Enzymes Producing Oxoferryl Species", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
120. J.Mizera, M.Ruggiero-Mikołajczyk, R.Socha, R.Grabowski "Badania wpływu metody nanoszenia złota 'osadzanie-strącanie' na obniżenie stężenia mobilnych form tlenu na nośniku", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
121. Ł.Mokrzycki, T.Machej "The Synthesis of a Structured Catalyst for a Total Oxidation of VOC (I): Ceramic Foam Carrier Preparation", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
122. Ł.Mokrzycki, T.Machej, A.Chojnacka, A.Kwapisz "The Synthesis of a Structured Catalyst for a Total Oxidation of VOC (II): Mn-Cu Catalyst Synthesis via Microemulsion Method", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
123. G.Mordarski, M.Mosiąlek, P.Nowak, M.Tatko "Direct Carbon Molten Carbonate Fuel Cell with Electrolyte-combined LiAlO₂ Matrix Fabricated by the Tap-casting Method", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
124. M.Morga, Z.Adamczyk, M.Oćwieja "Streaming Potential Studies of Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
125. M.Mosiąlek, M.Dudek, P.Nowak, R.P.Socha, G.Mordarski, A.Rapacz-Kmita "Oxygen Reduction Reaction on Silver Investigated with the Use of Silver Point Electrode and 20gdc Electrolyte", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
126. M.Mosiąlek, G.Mordarski, M.Dudek, E.Bielańska, J.Wojewoda-Budka, M.Tatko "Silver/LSM Composite Cathodes for SOFC, Preparation and Stability", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012

127. M.Nattich-Rak, A.Brątek-Skicki, P.Dąbrowska, Z.Adamczyk "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Latex Particles Determined by Zeta Potential and AFM Measurements", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
128. M.Nattich-Rak, M.Sadowska, Z.Adamczyk, K.Jamroży, D.Dronka-Góra, M.Góra, B.Kozik, M.Łuczyński, E.Bielańska "Mechanisms of Cellulose Fiber Size Reduction Determined via SEM and Optical Microscopy" 11th Int. Conf. NanoStructured Materials NANO2012, Rhodes 2012
129. M.Nattich-Rak, M.Wasilewska, M.Sadowska, Z.Adamczyk, J.Barbasz "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Mica", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
130. G.Nawrat, M.Gonet, T.Wieczorek, P.Nowak, "Electrode Materials for Hydrogen Evolution and Hydrogen Oxidation Reactions", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
131. A.Niecikowska, M.Krasowska, J.Ralston, K.Małyś "Influence of Bubble Size on Kinetics of Three Phase Contact Formation at Modified Titanium Dioxide Surfaces", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
132. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Electronic Properties of Modified Tungsten and Molybdenum Heteropolyacids. Cluster DFT Calculations", 14th Int. Conf. Theoretical Aspects of Catalysis, Vlissingen 2012
133. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "DFT Studies of Modified Tungsten and Molybdenum Heteropolyacids", 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012
134. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Struktura elektronowa modyfikowanych heteropolikwasów wolframowych. Obliczenia klasterowe DFT", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
135. P.Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Teoretyczny opis modyfikowanych heteropolikwasów molibdenowych", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
136. M.Nosek, P.Weroński "Cyclic Voltammetry as a Tool for Characterization of Lipid Vesicles", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
137. M.Nosek, P.Weroński, P.Nowak "Electrochemical Impedance Spectroscopy as a Tool for Characterization of Colloid Particle Monolayers", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
138. P.Nowak, G.Mordarski, E.Bielańska, D.Mucha, R.Dula "Controlled Galvanic Deposition of High Quality Nickel-rhenium Alloys", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, IKiFP PAN, Krakow 2012
139. M.Oćwieja, Z.Adamczyk "Silver Particle Monolayers of Controlled Density and Structure Prepared via Controlled Self-assembly", Conf. NANOFORMULATION 2012, Barcelona 2012

140. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, K.Kubiak, M.Kujda "Preparation of Silver Particle Monolayers of Controlled Coverage and Structure" 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
141. M.Oćwieja, Z.Adamczyk, M.Morga "Controlled Deposition of Silver Nanoparticles from the Heterogeneous Surfaces", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
142. K.Onik, E.Włoch, M.Derewiński, E.Ember, J.A.Lercher "Nowe materiały warstwowe jako katalizatory reakcji prowadzonych w fazie ciekłej", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
143. K.Onik, J.Podobiński, M.Derewiński "Warstwowe struktury porowate otrzymane w wyniku usieciowania zawiesin nanocząstek zeolitu MFI", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
144. M.Oszajca, A.Drzwiecka-Matuszek, A.Franke, M.Brindell, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, G.Stochel, R.Van Eldik "The Effect of N-Methylimidazole on the Reactivity of Model Complex of Compound II. A Combined Experimental and Theoretical Study", Int. Symp. Metal Complexes ISMEC, Lisbon 2012
145. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, E.Bielańska, M.Ruggiero-Mikołajczyk "Composites Containing Carbon Nanotubes and Nickel Compounds Prepared via Catalytic Chemical Vapour Deposition", Annual World Conf. on Carbon, Kraków 2012
146. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, E.Bielańska "Preparation and Characterization of the Electroactive Composites Containing Nickel Nanoparticles and Carbon Nanotubes", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
147. A.Pacuła, P.Nowak, R.P.Socha, M.Zimowska, M.Rugierro-Mikołajczyk "Examination of New Composites Derived from Co/Ni/Al Layered Double Hydroxides as Electrode Materials", Annual World Conf. on Carbon, Kraków 2012
148. A.Pacuła, R.P.Socha, M.Zimowska "Electrochemical Oxygen Reduction Reaction by Co Nanoparticles Supported on Nitrogen-doped Nanostructured Carbon", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
149. A.Pacuła, R.P.Socha, M.Zimowska, M.Ruggiero-Mikołajczyk, D.Mucha, P.Nowak, "Preparation of Electrocatalysts Containing Cobalt Nanoclusters and Nitrogen-doped Carbon Nanotubes and Their Activities for Oxygen Reduction Reaction in Alkaline and Acidic Media", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
150. A.Pacuła, K.Uosaki "Characterization of Electrochemical Features and Physicochemical Properties of the Composites Containing Cobalt and Nitrogen-doped Graphite-like Carbon" 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012

151. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "The Formation and Electrocatalytic Properties of the Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
152. A.Pajor-Świerzy, P.Warszyński "The Effect of Conductive Polyelectrolytes on the Formation of Electroactive Multilayer Films Containing Prussian Blue Nanoparticles and Their Application for H₂O² detection", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
153. K.Pamin, R.Karcz, J.Połtowicz, E.M.Serwicka "Sulfonowane metaloftalocyjaniny jako katalizatory reakcji utleniania fenolu", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
154. T.Pańczyk "Adsorption of Colloid Nanoparticles on Multi-walled Carbon Nanotubes Studied by Means of Molecular Dynamics Simulations", Conf. Chemical and Topological Functionalization of Graphitic Surfaces: Open Challenges for Computational Modeling CECAM-HQ-EPFL, Lausanne 2012
155. T.Pańczyk "A Magnetically Controlled Nanocontainer Composed of Magnetic Nanoparticles and Carbon Nanotubes. Monte Carlo Predictions of Its Properties", 5th Int. Conf. Molecular Materials MOLMAT 2012, Barcelona 2012
156. T.Pańczyk, W.Rudziński "Surface Heterogeneity of Multi-Walled Carbon Nanotubes Studied By Means Of Molecular Dynamics Simulations", 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012
157. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Polyelectrolyte Coated Nanocapsules: Neuroprotective Drug Delivery System", 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012
158. M.Piotrowski, K.Szczepanowicz, D.Jantas, W.Lasoń, P.Warszyński "Emulsion-core and (bio)Polyelectrolyte Shell Nanocapsules for Neuroprotective Drug Delivery", Konf. Nano-Biotechnology PL 2012, Warszawa 2012
159. A.Płazińska, W.Płaziński, K.Józwiak "Molecular Dynamics Simulation of Structural and Thermodynamic Properties of Fenoterol Stereoisomers and beta2-Adrenergic Receptor", 5th Conversatory on Medicinal Chemistry, Lublin 2012
160. W.Płaziński "Sorption of Metal Cation by Alginate-based Biosorbents: Determination of the Thermodynamic Parameters", 22nd Int. Conf. Chemical Thermodynamics, Buzios 2012
161. W.Płaziński, M.Drach "The Dynamics of Calcium Binding by Alginates. Application of the Transition Path Sampling Method", Conf. Free Energy Calculations: From Theory to Applications, Paris 2012
162. W.Płaziński, M.Drach "The Dynamics of Calcium Binding by Alginates. Application of the Transition Path Sampling Method", Conf. Computation of Transition Trajectories and Rare Events in Non-equilibrium Systems, Lyon, 2012

163. W. Płaziński, M. Drach "The Dynamics of Calcium Binding by Alginates. Application of the Transition Path Sampling Method", 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012
164. W. Płaziński, W. Rudziński "Sorption of Metal Cation by Alginate-based Biosorbents: Determination of the Thermodynamic Parameters", 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012
165. W. Płaziński, W. Rudziński "Sorption of Metal Cation by Alginate-based Biosorbents: Determination of the Thermodynamic Parameters", 6th Pacific Basin Conf. Adsorption Science and Technology, Taipei 2012
166. M. Pokora, L. Horla, A. Martyla, E. Bielańska, A. Kowal "Synthesis and Properties of SnO₂ Nanograins", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
167. M. Radoń, J. Szklarzewicz, E. Broclawik "Spin States Energetics of Heme and Related Complexes", Central European Symp. Theoretical Chemistry, Mariapfarr 2012
168. M. Radoń, J. Szklarzewicz, E. Broclawik "Stany spinowe centrów hemowych i modeli hemopodobnych", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
169. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, E. Doleżyńska Sewerniak, W. Łasocha "X-Ray Powder in Investigations of Yellow Earth Pigments", 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Anniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Kraków 2012
170. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, E. Doleżyńska Sewerniak, W. Łasocha "Dyfraktometria proszkowa w badaniach żółtych pigmentów ziemnych", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
171. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, J. Olszewska-Świetlik. B. Szmelter-Fausek. W. Łasocha "X-Ray Powder Micro-diffraction Investigations of Selected Pigments in Seventeenth-century Paintings.", 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Anniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Kraków 2012
172. A. Rafalska-Łasocha, M. Grzesiak, J. Olszewska-Świetlik. B. Szmelter-Fausek. W. Łasocha "Zastosowanie techniki m-XRPD do badań pigmentów w XVII wiecznych obrazach", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
173. A. Rugor, J. Demer, M. Szaleniec, A. Bojarski, M. Witko, M. Boll, G. Fuchs "Nowa C-25 hydroksylaza steroidowa jako użyteczne narzędzie do syntezy farmaceutyków", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
174. A. Rugor, J. Dermer, M. Szaleniec, M. Witko, A. Bojarski "A Novel Steroid C-25 Dehydrogenase as a Useful Tool in Synthesis of Pharmaceuticals", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
175. D. Rutkowska-Żbik, W. Macyk "Badanie właściwości fotochemicznych kompleksów Ti(IV) metodą TD-DFT", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012

176. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "MoO₃/ZSM-5 as Catalyst for Catalytic Methane Aromatization: DFT Studies on Formation of Active Phase and Reaction Mechanism", 15th Int. Congr. Catalysis, Munchen 2012
177. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, R.Gryboś, M.Witko "DFT Studies on the Active Phase Composition of MoO₃/ZSM-5 and its Influence on Methane Aromatization Reaction", 8th Int. Sym. Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow 2012
178. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Catalytic Methane Aromatization on MoO₃/ZSM-5: Theoretical Studies on Reaction Mechanism", Conf. Modeling & Design of Molecular Materials 2012, Wroclaw 2012
179. D.Rutkowska-Żbik, R.Tokarz-Sobieraj, M.Witko "Opis mechanizmu procesu aromatyzacji metanu na katalizatorach opartych na MoO₃. Obliczenia klasterowe DFT", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
180. D.Rutkowska-Żbik, A.A.Umińska, A.Drzewiecka-Matuszek, M.Witko "Mechanizm epoksydacji cykloheksenu w warunkach katalitycznych i przez bezpośrednią reakcję z nadtlenukami", 7. Kongres Technologii Chemicznej, Kraków 2012
181. D.Rutkowska-Żbik, M.Witko, A.Kania, Ł.Orzeł, G.Stochel, L.Fiedor, M.Pilch "Badania nad właściwościami koordynacyjnymi chlorofili w rozpuszczalnikach organicznych", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
182. M.Sadowska, K.Jamroży, Z.Adamczyk, M.Nattich-Rak, D.Dronka-Góra, M.Góra, B.Kozik, M.Łuczyński "Changes of Cellulose Particles' Size upon Hydrothermal Treatment Determined via Laser Diffraction, SEM and Optical Microscopy", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
183. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Morga, M.Oćwieja "Hematite Nanoparticle Monolayers on Mica: Characterization by Colloid Deposition", 55. Zjazd PTChem i SITPChem, Białystok 2012
184. M.Sadowska, M.Nattich-Rak, Z.Adamczyk, M.Wasilewska "Mechanisms of Fibrinogen Adsorption on Mica and Monolayer Characteristics Determined via AFM, SEM and Optical Microscopy", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
185. R.P.Socha, J.Gurgul, M.Szczepanik-Ciba, E.Madej, B.Figarska, J.Przewoźnik, N.Spiridis, J.Korecki "Electronic and Magnetic Properties of the Fe/MnO(100) Interface", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
186. R.P.Socha, E.Madej, B.Figarska, J.Gurgul, J.Przewoźnik, N.Spiridis, M.Szczepanik, J.Korecki "Właściwości elektronowe i magnetyczne interfejsu Fe/MnO(100) przed i po wygrzaniu", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
187. R.P.Socha, M.Zimowska, L.Matachowski, J.Dziedzic, J.Gurgul "Wpływ promieniowania UV na powierzchnie soli Ag₃PW₁₂O₄₀ i Ag₃PMo₁₂O₄₀ w warunkach normalnych", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

188. R.P.Socha, M.Zimowska, L.Matachowski, J.Dziedzic, J.Gurgul "The Influence of UV Illumination on $\text{Ag}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ and $\text{Ag}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ Surfaces in Standard Conditions", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
189. M.Sowa, R.P.Socha, W.Simka "Anodic Oxidation of Zirconium in Silicate Solutions", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
190. P.Stén, S.Engblom, S.Heikkilä, T.Andersson, P.Nowak "Column Leaching Experiments on Acid Sulfate Soils from the Risöfladan Experimental Field (Vaasa, Finland)", 7th Int. Acid Sulfate Soil Conf., Espoo 2012
191. M.Strojecki, Ł.Bratasz, T.Łojewski, K.Jaskot "Monitoring poziomu zapylenia w kościołach zabytkowych", Konf. 'Analiza Chemiczna w Ochronie zabytków', Warszawa 2012
192. M Szaleniec, T.Borowski, M.Witko, J.Heider "The Influence of the Protein Environment on the Mechanism of Ethylbenzene Dehydrogenase - a QM:MM Study", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
193. M.Szczepanik, N.Spiridis, E.Madej, B.Figarska, R.P.Socha, B.Strzelczyk, J.Korecki "Charakteryzacja struktury i stanów elektronowych epitaksjalnej warstwy spinelu Mn_3O_4 na podłożu $\text{Fe}_3\text{O}_4(100)$ ", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
194. M.Szczepanik-Ciba, N.Spiridis, E.Madej, B.Figarska, R.P.Socha, B.Strzelczyk, J.Korecki "Structure and Electronic States of Epitaxial Mn_3O_4 Film on Fe_3O_4 Substrate", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
195. K.Szczepanowicz, S.Łukasiewicz, M.Piotrowski, K.Podgórna, D.Jantas, W.Lasoń, M.Dziedzicka-Wasylewska, P.Warszyński "Emulsion Based Nanocapsules for Targeted Drug Delivery Systems", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
196. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, T.Kruk, M.Piotrowski, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules as Drug Carriers", Conf. Colloids and Nanomedicine 2012, Amsterdam 2012
197. K.Szczepanowicz, K.Podgórna., M.Krzak, M.Elźbieciak-Wodka, Sz.Wojtyła, J.Zawała, P.Nowak, P.Warszyński "Emulsion Based Capsules for Corrosion Protection", 5th Int. Workshop Bubble and Drop Interfaces B&D 2012, Kraków 2012
198. K.Szczepanowicz, K.Podgórna, M.Piotrowski, P.Warszyński "Polyelectrolyte Nanocapsules with Emulsion Core", 26th Conf. European Colloid and Interface Society ECIS 2012, Malmo & Lund 2012
199. D.Szepietowska, B.Sulikowski "Synthesis of Ammonium Salts of 12-Tungstophosphoric Heteropolyacid", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
200. L.Szyk-Warszyńska, K.Kilan, J.Piekoszowska, R.Socha, P.Warszyński "Thickness and Stability of PLL/Casein and PLAr/Casein Multilayer Films", 9th Int. Symp. Polyelectrolytes ISP2012, Lausanne 2012

201. L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, T.Kruk, M.Zimowska, R.Wendelbo, P.Warszyński "The Effect of UV, Chemical and Heat Treatment on Formation of Graphene Films from Graphene Oxide", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
202. L.Szyk-Warszyńska, R.P.Socha, T.Kruk, M.Zimowska, R.Wendelbo, P.Warszyński "The Effect of Heat Treatment on Formation of Graphene/PEI Films from Graphene oxide/PEI Multilayers", 3rd Int. Symp. Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Krakow 2012
203. A.Szymańska, M.Grzesiak, W.Łasocha, W.Nitek "Synteza i badania strukturalne soli sodowych i potasowych z kwasami dikarboksyłowymi", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
204. A.Szymańska, W.Łasocha, R.Karcz, K.Pamin, J.Połtowicz "Badanie właściwości katalitycznych tlenowych kompleksów molibdenu w procesie utleniania cykloalkanów", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
205. A.Szymańska, W.Nitek, W.Łasocha "Synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne związku $\{MoO_3[C_6H_4(NH_2)_2]\}_n$ ", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
206. A.Szymańska, W.Nitek, A.Rafalska-Łasocha, W.Łasocha "Synteza i badania strukturalne nowych dekawanadanów", 54. Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2012
207. M.Ślęzak, T.Giela, D.Wilgocka-Ślęzak, A.Kozioł-Rachwał, N.Spiridis, T.Ślęzak, E.Młyńczak, M.Zajac, M.Chrobak, M.Czapkiewicz, M.Dobrzański, T.Kołodziej, A.Kozłowski, M.Wojtyniak, R.Zdyb, F.Nolting, A.Kleibert, N.Pilet, J.Raabe, B.Sarafimov, C.Quitmann, J.Korecki, "Polish PEEM at Swiss Light Source", 7th Int. Workshop Nano-scale Spectroscopy and Nanotechnology, Zurich 2012
208. M.Śliwa, R.Grabowski, K.Samson, M.Ruggiero-Mikołajczyk, J.Mizera "Acidic Component Influence on Catalytic Properties of Hybrid Catalysts for Dimethyl Ether Synthesis", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
209. M.Tataruch, M.Szalaniec, A.Dudzik, K.Szymańska, M.Witko, J.Bryjak, A.Jarzębski, J.Heider, E.Luchter-Wasylewska "Immobilizacja dehydrogenaz etylobenzenowej i fenyloetanolowej", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
210. M.Tatko, M.Mosiąlek, E.Bielańska "Synthesis and Characterization of Silver Containing LSCF", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
211. V.Ulaganathan, M.Lotfi, M.Karbaschi, M.Krzan, K.Małyś, G.Gotchev, A. avadi, R.Miller "Studies on the Bubble Rising in Mixed Protein/Surfactant Solutions", 9th European Conf. Foams, Emulsions and Applications EUFOAM 2012, Lisbon 2012
212. A.A.Umińska, A.Drzewiecka-Matuszek, D.Rutkowska-Żbik, M.Witko "Otrzymywanie epitlenku cykloheksenu w warunkach katalitycznych oraz przez bezpośrednią reakcję z nadtlenokwasami - badania teoretyczne metodą DFT", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

213. T.Urbańczyk, M.Strojecki, J.Koperski "Tests of Bell Inequalities for Entangled Cadmium Atoms", Young Atom Optician Conf. YAO2012, Krakow 2012
214. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Hydrogen Atom Abstraction vs Electrophilic Attack on Aromatic Ring by Non-heme Fe(IV)=O. HMS and HPPD Case studies", Conf Challenges in Biomolecular Modeling - from QM to Coarse-Graining, Stockholm 2012
215. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Hydrogen Atom Abstraction vs Electrophilic Attack on Aromatic Ring by Non-heme Fe(IV)=O. HMS and HPPD Case Studies", 11th European Biological Inorganic Chemistry Conf., Granada 2012
216. A.Wójcik, E.Broclawik, P.E.M.Siegbahn, T.Borowski "Hydrogen Atom Abstraction vs Electrophilic Attack on Aromatic Ring by Non-heme Fe(IV)=O. HMS and HPPD Case Studies", 1. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków 2012
217. M.Zimowska, R.Dula, R.P.Socha, J.Gurgul, B.Napruszewska, J.Plona, E.M.Serwicka "Nanostruktura quasi-amorficznych katalizatorów tlenkowych CuMnAl-O otrzymanych z prekursorów hydrotalkitowych", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
218. M.Zimowska, B.D.Napruszewska, A.Michalik-Zym, R.Dula, E.M.Serwicka "Kontrola nukleacji oraz wzrostu krystalitów warstwowych prekursorów hydrotalkitowych w układzie odwróconej mikroemulsji", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012
219. M.Zimowska, H.Pálková, J.Madejová, R.Dula, Z.Olejniczak, K.Pamin, E.M.Serwicka "Alumination of Laponite-derived Porous Clay Heterostructures (PCHs)", 44. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 2012

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. A.Bielański "Wodór, paliwo przyszłości", Stowarzyszenie Doktorantów UJ, Wydział Chemii UJ, 2012
2. A.Bielański "Adam Stanisław Skąpski więzień sowieckich obozów pracy", Uniwersytet Trzeciego Wieku AGH, 2012
3. T.Borowski "Wprowadzenie do modelowania molekularnego", School on Plant and Microbial Biotechnology, Uniwersytet Śląski, Katowice 2012
4. T.Borowski "Modelowanie molekularne w naukach biologicznych: od zrozumienia mechanizmu reakcji biochemicznej do projektowania nowych białek", School on Plant and Microbial Biotechnology, Uniwersytet Śląski, Katowice 2012
5. Ł.Bratasz "Klimat historyczny", Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2012
6. Ł.Bratasz "Ogrzewanie budowli zabytkowych", Wydział Architektury, Politechnika Krakowska, Kraków 2012

7. J.Korecki "Jądrowe, rezonansowe rozpraszanie promieniowania synchrotronowego, czyli druga młodość efektu Mössbauera", Narodowe Centrum Promieniowania Synchrotronowego, Instytut Fizyki, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2012
8. J.Korecki "Czy powierzchnię rzeczywiście wymyślił diabeł?"; Katedra Fizyki Ciała Stałego, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków 2012
9. R.Kozłowski "Cement romański - projekty Komisji Europejskiej przywracają historyczny materiał ochronie zabytków - projekt ROCARE", Konf. Krajowego Punktu Kontaktowego 'Projekty 7PR UE w Priorytecie ŚRODOWISKO z polskimi partnerami', Warszawa 2012
10. R.Kozłowski "Zarządzanie dziedzictwem kultury - wyzwania dla nauk ścisłych", Posiedzenie III Wydziału PAN, Warszawa 2012
11. M.Łukomski "Projekt SMooHS - inteligentne monitorowanie obiektów zabytkowych", Konf. Krajowego Punktu Kontaktowego 'Projekty 7PR UE w Priorytecie ŚRODOWISKO z polskimi partnerami', Warszawa 2012
12. M.Witko "Institute of Catalysis: From Experiment to Industry" Centrum Badan i Rozwoju Petrobras (CENPES), Rio de Janeiro 2012
13. M.Witko "Institute of Catalysis: What Can We Offer to Industry", FIRJAN, Sao Paulo 2012
14. M.Witko "Profesor Adam Bielański - Mistrz i Nauczyciel", Sesja Jubileuszowa 100-lecia urodzin Profesora Adama Bielańskiego, PAU, Kraków 2012
15. M.Witko "Dziś i jutro Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN", Warsztaty ISD MolMed, Ochotnica 2012

WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. E.Broclawik "Chemia fizyczna II", wykład dla doktorantów MSD IKiFP PAN - 14 godz.
2. E.Broclawik "Chemia kwantowa makromolekuł", wykład na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Nanotechnologii UJ - 30 godz.
3. E.Broclawik "Wprowadzenie do modelowania molekularnego", wykład dla doktorantów ISD MolMed - 2 godz.
4. M.Derewiński "Postawy spektroskopii IR i Ramana", wykład dla doktorantów MSD IKiFP PAN - 4 godz.
5. A.Drelinkiewicz "Termodynamika", wykład dla doktorantów MSD IKiFP PAN - 20 godz.
6. M.Derewiński "Podstawy spektroskopii IR i Ramana", wykład dla doktorantów ISD AGH, - 4 godz.
7. R.Grabowski "Adsorpcja na powierzchni ciał stałych", wykład dla MSD IKiFP PAN

8. J.Gurgul "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis:", wykład na Akademii Górniczo-Hutniczej, Kraków - 2 godz,
9. J.Gurgul "Spektroskopia XPS", wykład dla doktorantów MSD IkiFP PAN - 2 godz.
10. J.Gurgul "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis", wykład dla doktorantów ISD MolMed - 2 godz.
11. B.Jachimska "Metoda Dynamicznego Rozpraszania Światła (DLS) pomiary wielkości cząstek koloidalnych", AGH Wydział Inżynierii Materiałowej
12. B.Jachimska "Laser Doppler Velocimetry - Pomiary Ruchliwości Elektroforetycznej cząstek koloidalnych", AGH Wydział Inżynierii Materiałowej
13. W.Łasocha "Chemia fizyczna", wykład dla doktorantów MSD IkiFP PAN
14. W.Łasocha "Metody fizykochemiczne w katalizie", wykład dla doktorantów MSD IkiFP PAN
15. E.Serwicka "Minerały w katalizie" wykład na Wydziale Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH - 10 godz.
16. B.Sulikowski "Wstęp do adsorpcji gazów na ciałach stałych", wykład na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej
17. B.Sulikowski "Wstęp do chemii zeolitów", wykład na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. D.Beatle (Ian Wark Research Institute, University of South Australia) "In situ ATR FTIR Spectroscopy of Polymer Adsorption at Interfaces"
2. A.Góra (Masaryk University Brno) "Rational Approach for Tunnel Redesign in Enzymes"
3. E.Iglesia (Department of Chemistry, University of California, Berkeley) "Consequences of Acid Strength and Solvation in Catalysis Mediated by Ion-Pair Transition States"
4. I.Kocemba (Politechnika Łódzka) "Rola adsorpcji i katalizy w detekcji gazów z użyciem półprzewodnikowych czujników gazowych"
5. D.Malina (Politechnika Krakowska) "Otrzymywanie i charakterystyka hydroksyapatytu modyfikowanego srebrem"
6. K.Mikoś (Uniwersytet Jagielloński) "Co naprawdę Majowie przepowiedzieli na dzień 21 grudnia 2012?" [wykład bożonarodzeniowy]

7. Z.Mirek (Instytut Botaniki PAN) "Pomiędzy Homo Naturalis a Image Dei" [wykład wielkanocny]
8. B.Petelenz (Instytut Fizyki Jądrowej PAN) "Tło i niektóre konsekwencje odkryć Marii Skłodowskiej-Curie"
9. M.Thommes (Quantachrome Instruments) "Progress and Challenges in the Structural Characterization of Mesoporous Materials by Physical Adsorption"
10. B.Tyliszczak (Politechnika Krakowska) "Otrzymywanie i właściwości hydrożeli akrylowych zdolnych do kontrolowanego uwalniania nawozów mineralnych"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. J.Barbasz " Procesy adsorpcji na obiektach o skończonych rozmiarach"
2. M.Kolasińska-Sojka "Wielowarstwowe filmy nanokompozytowe"
3. E.Madej "Modelowe metaliczne i bimetaliczne katalizatory na powierzchniach monokrystalicznych"
4. W.Płaziński "Modelowanie molekularne kompleksów wapnia z kwasami uronowymi"
5. M.Strojecki "Emisja akustyczna zabytkowej szafy - krok w stronę racjonalnej ochrony zbiorów muzealnych"

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. A.Bielański "Powstanie i rozpowszechnienie pierwiastków we Wszechświecie"
2. T.Borowski "Odrobina chemii w filizance"
3. Ł.Bratasz "Globalne ocieplenie - zabytki w niebezpieczeństwie"
4. E.Jarek "Czy białe jest białe i dlaczego widzimy świat w kolorach?"
5. M.Szaleniec "Chemia chleba"

NADANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

DOKTORA HABILITOWANEGO

1. Ł.Ćwiklik (J.Heyrovsky Institute of Physical Chemistry CzAS, Prague) "Wpływ lokalnego uporządkowania cząsteczek wody na właściwości fizykochemiczne w fazach skondensowanych, na powierzchniach oraz na granicach faz w układach biologicznych"
2. B.Jachimska "Konformacja polielektrolitów i białek w roztworach elektrolitów a topologia tworzonych warstw na powierzchniach modelowych"

DOKTORA

1. M.Elżbiaciak-Wodka "Effect of Deposition Conditions on Thickness and Permeability of the Multilayer Films Formed from Synthetic and Natural Polyelectrolytes" (promotor P.Warszyński)
2. U.Filek "Synteza, charakterystyka i aktywność katalityczna soli glinowych, galowych i indowych heteropolikwasów HPW i HPMo w wybranych reakcjach w fazie ciekłej" (promotor B.Sulikowski)
3. J.Janas "Wpływ natury i lokalnego otoczenia jonów metali przejściowych w dealuminowanym zeolicie beta na jego aktywność w selektywnej katalitycznej redukcji NO w obecności różnych rodzajów reduktorów" (promotor S.Dźwigaj)
4. R.Karcz "Influence of Transition Metal Position in Heteropolyacids on Their Catalytic Activity in Oxidation of Hydrocarbons" (promotor E.Serwicka-Bahranowska)
5. K.Kleszcz (Instytut Fizyki Jądrowej im. Henrika Niewodniczańskiego PAN) "Nikiel-63 i technet-99 - metodyka oznaczania i obecność w środowisku" (promotor J.Mietelski IFJ PAN)
6. E.Madej "Modelowe metaliczne i bimetaliczne katalizatory na powierzchniach monokrystalicznych" (promotor J.Korecki)
7. B.Rachwał "Modelling of Response of Polychrome Wood to Climatic Variations" (promotor R.Kozłowski)
8. M.Wasilewska "Określenie konformacji wybranych białek w roztworach wodnych oraz na powierzchniach międzyfazowych o kontrolowanym stopniu heterogeniczności" (promotor Z.Adamczyk)
9. D.Wilk "Odpowiedź strukturalna zapraw z cementów romańskich na wysychanie" (promotor R.Kozłowski)
10. D.Wodka "Influence of Metal and Metal Oxide Nanoparticles Deposition on the Titanium Dioxide Photoactivity" (promotor P.Nowak)

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

1. XLIV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 14-16 marca 2012 (B.Sulikowski)
2. 4th Meeting X-Ray Techniques in Investigations of the Objects of Cultural Heritage. Celebrating the 100th Anniversary of Crystal X-Ray Diffraction, Krakow, May 17th-19th, 2012 (R.Kozłowski, W.Łasocho)
3. 5th International Workshop Bubble and Drop Interfaces B&S 2012, Krakow, May 20th-24th, 2012 (K.Małyś, B.Jachimska)
4. 3rd International Symposium on Surface Imaging / Spectroscopy at the Solid / Liquid Interface, Krakow, Mat 25th-June 1st, 2012 (P.Nowak)

5. 8th International Symposium Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids ISSHAC-8, Krakow, August 26th-31st, 2012 (W.Rudziński)
6. Sesja Jubileuszowa 100-lecia urodzin Profesora Adama Bielańskiego, Kraków, 14 grudnia 2012 (M.Witko)

IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. Festiwal Nauki "Teoria-Poznanie-Doświadczenie", Rynek Główny, Kraków 9-12 maja 2012 (M.Derewiński)
2. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 19 października 2012 (R.Kozłowski)