



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

**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2005**



Kraków, marzec 2006

SPIS TREŚCI

Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu	5
Zadania badawcze realizowane w roku 2005	7
Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2005	13
Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2005	19
Działalność statutowa Instytutu	19
Projekty badawcze KBN, MNiI, MEiN – własne	73
Projekty badawcze KBN, MNiI, MEiN – promotorskie	91
Projekty badawcze zamawiane	
Krajowe Sieci Naukowe	107
Projekty 5. Programu Ramowego UE	111
Projekty 6. Programu Ramowego UE	117
Inne projekty badawcze UE	129
Projekty Funduszy Strukturalnych UE	133
Polsko-Ukraińskie Laboratorium Katalizy	137
Współpraca z innymi instytucjami i przemysłem w roku 2005	143
Dorobek naukowy Instytutu za rok 2005	145
Publikacje naukowe ogłoszone drukiem	145
Udział w konferencjach i zebraniach naukowych	183
Raport Międzynarodowej Komisji Doradczej	217
Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu	219

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie prowadzi obszerną działalność badawczą w zakresie nauki o katalizie i chemii koloidów, a także rozległą działalność dydaktyczną, m.in. w ramach Międzynarodowego Studium Doktoranckiego i upowszechniającą osiągnięcia naukowe przez organizację konferencji naukowych oraz imprez popularyzujących naukę.

Zakres problematyki badawczej Instytutu obejmuje wyjaśnienie złożonych procesów fizykochemicznych, jakie towarzyszą zjawisku katalizy oraz analizę przemian i oddziaływań zachodzących w układach koloidalnych. Zagadnienia te dotyczą procesów przebiegających na granicach międzyfazowych ciało stałe/gaz, ciało stałe/ciecz oraz ciecz/gaz. Charakter prowadzonych badań jest wybitnie interdyscyplinarny. Łączą one bowiem istotne aspekty chemii, fizyki, technologii chemicznej i inżynierii materiałowej, a ich podstawowym celem jest opracowanie naukowych podstaw dla praktycznych zastosowań, m.in. w zakresie opracowania „inteligentnych” katalizatorów dostosowanych do potrzeb określonej reakcji chemicznej, optymalizacji procesów katalitycznych, generowania pożądanych właściwości w układach zdyspergowanych i kontroli właściwości powierzchniowych cieczy. Zainteresowania badawcze ukierunkowane są przede wszystkim na zagadnienia: kinetyki i mechanizmu reakcji oraz modelowania teoretycznego procesów katalitycznych w układach heterogenicznych, homogenicznych i enzymatycznych, katalitycznych procesów utleniania węglowodorów i usuwania zanieczyszczeń środowiska, projektowania, syntezy i mechanizmu działania nowych układów katalitycznych na osnowie tlenków, zeolitów i mezoporowatych sit molekularnych, struktury granic międzyfazowych i termodynamiki procesów zachodzących na granicy faz, natury oddziaływań i zjawisk transportowych w układach koloidalnych, stabilność układów zdyspergowanych oraz mechanizmów wpływu zanieczyszczeń na stan budowli i obiektów zabytkowych.

W roku 2005 (z perspektywą kontynuowania w kolejnych latach) wykonywano następujące tematy działalności statutowej Instytutu:

1. Innowacyjne katalizatory do przeróbki węglowodorów
2. Fizykochemia metalicznych i tlenkowych monowarstw i nanoklasterów
3. Struktury nanoporowate jako podstawa nowych materiałów katalitycznych
4. Kataliza w ochronie ekosystemu
5. Mechanizmy procesów biokatalitycznych
6. Dynamika układów dyspersyjnych i biokoloidalnych
7. Struktury samoorganizujące się i monowarstwy nanocząstek
8. Mechanizm oddziaływania zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe i metody ich ochrony.

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

Instytut od początku istnienia jest ośrodkiem integrującym badania w dziedzinie katalizy i fizykochemii powierzchni w skali całego kraju, organizując m.in. liczne konferencje i seminaria, w tym cieszące się ogromną popularnością coroczne Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne. W roku 2005 uruchomiono, integrujący znaczną część środowiska

katalitycznego w Polsce, projekt badawczy zamawiany PBZ-KBN-116/T09/2004 "Nowe materiały katalityczne jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska". Uczestniczy w nim 13 zespołów badawczych z następujących instytucji naukowych: IkiFP PAN, Politechniki Łódzkiej, Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej, Uniwersytetu Wrocławskiego, Politechniki Szczecińskiej, Uniwersytetu Jagiellońskiego, Instytutu Chemii Przemysłowej, Uniwersytetu Adama Mickiewicza.

Instytut stał się ważnym ogniwem europejskiego obszaru badawczego. Wyrazem uznania znaczenia naukowego było m.in. przyznanie Instytutowi przez Komisję Europejską w roku 2002 statusu Centrum Doskonałości "CatColl", a w 2004 jego krajowego odpowiednika. W roku 2005 w Instytucie wykonywano 3 projekty badawcze 5. Programu Ramowego UE, 9 projektów badawczych i koordynacyjnych 6. Programu Badawczego UE i 1 projekt Eureka.E!. Uruchomiono projekt finansowany z funduszy strukturalnych UE: SPO-WKP 1.4.1. "Wdrożenie technologii cementu romańskiego do praktycznej konserwacji zabytków".

Działalność dydaktyczna Instytutu rozwijana jest głównie w oparciu o Międzynarodowe Studium Doktoranckie prowadzone wspólnie z Politechniką Krakowską i Politechniką Rzeszowską. W roku akademickim 2005/2006 liczba słuchaczy wynosiła 52, przy czym w roku 2005 przyjęto 8 nowych doktorantów. Od początku istnienia studium obronami prac doktorskich ukończyło naukę 26 osób. W Instytucie wykonywane są także prace magisterskie i odbywają się praktyki studenckie studentów starszych lat. W roku 2005 pracownicy Instytutu opiekowali się 20 osobami, w tym 18 magistrantami.

Instytut posiada szerokie tradycje i doświadczenie w upowszechnianiu i popularyzacji wiedzy. Organizuje corocznie szereg konferencji naukowych (w roku 2005 – 10), głównie międzynarodowych, obejmujących różne zagadnienia naukowe, oraz seminaria zapraszanych, uznanych autorytetów naukowych i pracowników Instytutu.

Od roku 2002 corocznie organizowane są Dni Otwarte Instytutu cieszące się ogromnym zainteresowaniem, a od roku 2005 Instytut współorganizuje Krakowski Festiwal Nauki.

ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2005

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Innowacyjne katalizatory do przeróbki węglowodorów

- | | |
|---|----|
| 1.1. Utleniające odwodornienie propanu i etanu na układach CrO_x /nośnik tlenkowy z domieszkami: porównanie z reakcją izobutanu | 23 |
| 1.2. Efekt domieszek różnych metali alkalicznych do katalizatorów VO_x/SiO_2 i VO_x/MgO na właściwości katalityczne w reakcji utleniającego odwodornienia propanu oraz rozkładu izopropanolu (reakcji-sondy właściwości kwasowo-zasadowych) | 24 |
| 1.3. Synteza nowych typów heteropolikwasów | 25 |
| 1.4. Wpływ struktury heteropolikwasu naniesionego na krzemionkę lub Al_2O_3 na selektywność i wydajność reakcji uwodnienia propylenu | 26 |
| 1.5. Badanie aktywności katalitycznej ftalocyjanin kobaltu, manganu i żelaza z różnymi podstawnikami w pierścieniu kompleksu w reakcji hydroksylacji węglowodorów z różnymi donorami tlenu | 27 |
| 1.6. Badanie mechanizmu adsorpcji i dysocjacji wodoru na powierzchniach katalizatorów do przeróbki węglowodorów | 28 |

2. Fizykochemia metalicznych i tlenkowych monowarstw i nanoklasterów

- | | |
|---|----|
| 2.1. Kwantowo-chemiczne badania reutlenionych powierzchni tlenków metali przejściowych | 31 |
| 2.2. Wpływ koordynacji metalu centralnego na właściwości katalityczne układów V-Mg-O | 32 |
| 2.3. Określenie kinetyki utleniającego odwodornienia propanu w warunkach stacjonarnych na katalizatorach VO_x/CeO_2 i $\text{KVO}_x/\text{CeO}_2$ | 33 |
| 2.4. Przemiany utleniania-redukcji metali przejściowych wbudowanych w strukturę TiO_2 i SiO_2 otrzymanych techniką zol-żel | 34 |
| 2.5. Badanie topografii powierzchni metali i tlenków w skali nanometrów | 35 |
| 2.6. Wzrost i dyfuzja Fe na wycinalnej powierzchni W(110) | 36 |
| 2.7. Oddziaływanie gazów szlachetnych z powierzchnią metali przejściowych i ich wodorków | 37 |

3. Struktury nanoporowate jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

- | | |
|---|----|
| 3.1. Podstawione izomorficznie sita molekularne jako podstawa otrzymywania układów mikro/mezoporowatych | 41 |
| 3.2. Transformacje węglowodorów aromatycznych na katalizatorach zeolitowych | 42 |
| 3.3. Krzemiany warstwowe jako podstawa mezoporowatych sit molekularnych, c.d. | 43 |
| 3.4. Właściwości strukturalne i elektronowe kationowych centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne, c.d. | 44 |

4. Kataliza w ochronie ekosystemu

- | | |
|--|----|
| 4.1. Opracowanie stabilnego termicznie katalizatora platynowego do utleniania związków organicznych zawierających tlen, c.d. | 47 |
| 4.2. Opracowanie katalizatora do niskotemperaturowego utleniania zanieczyszczeń organicznych | 48 |
| 4.3. Utlenianie CO, etanu i propanu na układach nanocząstki złota/tlenki mieszane | 49 |

4.4. Warstwowe związki manganu jako osnowa układów katalitycznych do całkowitego spalania związków organicznych	50
5. Mechanizmy procesów biokatalitycznych	
5.1. Mechanizm działania elektrod lakazowych	53
5.2. Strukturalne uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne, c.d.	56
5.3. Metabolity ksenobiotyczne metanotrofów jako element ich metabolonu – analiza dostępnych informacji	57
6. Dynamika układów dyspersyjnych i biokoloidalnych	
6.1. Wyznaczenie wpływu siły jonowej na kinetykę osadzania cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych	61
6.2. Wpływ szorstkości powierzchni hydrofobowej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz-ciecz-ciała stałe	62
6.3. Oddziaływania związków biologicznie czynnych z modelowymi membranami fosfolipidowymi	63
6.4. Adsorpcja cząstek biokoloidalnych na powierzchni włókien polimerowych, c.d.	64
7. Struktury samoorganizujące się i monowarstwy nanocząstek	
7.1. Wyznaczenie struktury i właściwości elektrokinetycznych multiwarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach międzyfazowych	67
7.2. Wpływ polaryzowalności przeciwjonów na ich aktywność powierzchniową w obecności surfaktantów kationowych	68
8. Mechanizm oddziaływania zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe i metody ich ochrony	
8.1. Określenie bezpiecznych wielkości i częstotliwości fluktuacji parametrów powietrza w otoczeniu zabytków drewnianych	71
PROJEKTY BADAWCZE (GRANTY) KBN	
Projekty badawcze własne	
1. 4 T09A 099 23 [2002-2005] Synteza eterów trzeciorzędowych na heteropolikwasach typu Dawsona jako katalizatorach	75
2. 4 T09A 038 24 [2003-2005] Wpływ struktury molekularnej substancji powierzchniowo aktywnych na ich adsorpcję i samoorganizację na ciekłych granicach międzyfazowych	76
3. 4 T09A 015 24 [2003-2005] Opis teoretyczny ewolucji czasowej układów adsorpcyjnych z powierzchnią energetycznie/strukturalnie heterogeniczną	77
4. 4 T08C 036 25 [2003-2006] Synteza powłok ferrierytowych na podłożach metalowych metodą in-situ i określenie ich właściwości fizykochemicznych	78

5.	4 T09A 076 25 [2003-2005]	79
	Mechanizmy tworzenia monowarstw cząsteczek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych i przewodzących	
6.	3 T09B 122 26 [2004-2007]	80
	Zastosowanie fluorowego układu dwufazowego FBS (Fluorous Biphasic System) do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów	
7.	3 T08D 003 26 [2004-2005]	81
	Podstawy technologii otrzymywania złożonych materiałów tlenkowych do neutralizacji par toksycznych rozpuszczalników	
8.	3 T09B 066 26 [2004-2007]	82
	Mezoporowate nośniki krzemionkowe jako narzędzie do sterowania procesami katalizowanymi przez makrocykliczne metalokompleksy	
9.	2 P04A 042 26 [2004-2006]	83
	Struktura i aktywność enzymatyczna syntazy kwasu klawaminowego: teoretyczne badanie mechanizmu reakcji katalitycznej	
10.	3 T09A 066 27 [2004-2006]	84
	Opracowanie metodyki otrzymywania i określenie właściwości fizykochemicznych syntetycznych związków typu hydrotalkitu zawierających mangan	
11.	3 T09A 089 27 [2004-2006]	85
	Zlokalizowana adsorpcja cząstek koloidalnych w procesach tworzenia pokryć wielowarstwowych metodą "warstwa po warstwie"	
12.	3 T09A 164 27 [2004-2006]	86
	Dynamiczne struktury adsorpcyjne - wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na zmiany ruchliwości powierzchni międzyfazowej	
13.	3 T08D 045 29 [2005-2007]	87
	Określenie mechanizmów fizykochemicznych tworzenia wielowarstwowych nanomateriałów ceramicznych o podwyższonej biokompatybilności	
14.	3 T09A 092 29 [2005-2009]	88
	Wpływ położenia metalu przejściowego w strukturze heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną i na mechanizm reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych	
15.	3 T09B 091 29 [2005-2009]	89
	Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych: metaloporfiryn, metaloftalocyjanin i metalosalenów do katalitycznego utleniania propylenu	
16.	3 T09A 029 29 [2005-2008]	90
	Membrany na bazie zeolitów typu MFI, FAU i BEA jako nowe nanomateriały dla procesów rozdziału mieszanin węglowodorów	

Projekty badawcze promotorskie (granty) KBN

1.	4 T08D 051 24 [2003-2005]	93
	Nowe materiały katalityczne: kompozyty minerałów warstwowych i heteropolizwiązków	
2.	4 T08A 004 25 [2003-2005]	94
	Struktura i morfologia powierzchni a adsorpcja CO na Au/Fe ₃ O ₄ (001)	

3.	4 T09B 115 25 [2003-2006]	95
	Utleniające odwodornienie izobutanu na domieszkowanych układach tlenków chromu i wanadu na nośnikach tlenkowych	
4.	4 T09B 108 25 [2003-2006]	96
	Wpływ domieszek do układów VO _x /nośnik tlenkowy na ich właściwości fizykochemiczne i katalityczne w reakcjach utleniającego odwodornienia niższych alkanów	
5.	3 T09A 034 26 [2004-2006]	97
	Nieodwracalna adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych	
6.	3 T09A 038 26 [2004-2005]	98
	Adsorpcja mieszanin jonowych i niejonowych związków powierzchniowo czynnych na granicach faz ciecz/gaz	
7.	3 T09A 085 [2004-2006]	99
	Właściwości powierzchniowe i elektryczne multiwarstw polielektrolitów osadzanych na makroskopowych powierzchniach	
8.	3 T09A 092 27 [2004-2006]	100
	Wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe	
9.	3 T09B 066 27 [2004-2007]	101
	Nanocząsteczki Au na nosnikach tlenkowych jako katalizatory utleniania CO i węglowodorów	
10.	3 T09A 062 28 [2005-2007]	102
	Biokatalityczne utlenianie etylobenzenu i jego pochodnych	
11.	3 T09D 010 28 [2005-2008]	103
	Mechanizm działania katalizatora rodowego do rozkładu tlenku diazotu w gazach emitowanych do środowiska	
12.	3 T09A 167 29 [2005-2008]	104
	Porównanie właściwości katalitycznych metaloporfiryn i ich μ -oxo-kompleksów w procesach utleniania węglowodorów	
13.	3 T09A 145 29 [2005-2008]	105
	Mechanizm oddziaływania cząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy badań adsorpcji oraz zjawisk elektrokinetycznych (promotorski)	

Projekty badawcze zamawiane KBN

1. PBZ-KBN-116/T09/2004 [2005-2008]
Nowe materiały katalityczne jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska
(uruchomiony 15.12.2005, decyzja MEiN K124/T09/2005)

KRAJOWE SIECI BADAWCZE

1. Nanomateriały jako katalizatory nowych, przyjaznych dla środowiska procesów **109**

ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE

Projekty 5. Programu Ramowego UE

1. EC 5th FP EVK4-CT-2001-00067 FRIENDLY HEATING [2001-2005] **113**
Friendly Heating: both Comfortable for People and Compatible with Conservation of Arts Works Preserved in Churches (STREP)
2. EC 5th FP EVK4-CT-2001-00084 ROCEM [2002-2006] **114**
Roman Cement to Restore Built Heritage Effectively (STREP-KOORDYNACJA)
3. EC 5th FP G5MA-CT-2002-04024 Centre of Excellence CATCOLL [2002-2005] **115**
Cracow Research Centre of Molecular Catalysis and Soft Matter Chemistry (CoE – KOORDYNACJA)

Projekty 6. Programu Ramowego UE

1. EC 6th FP NMP4-CT-2003-001516 DYNASYNC [2004-2007] **119**
Dynamics in Nano-scale Materials Studied with Synchrotron Radiation (STREP-KOORDYNACJA)
2. EC 6th FP MTKD-CT-2004-509832 TOK-CATA [2004-2008] **120**
Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts (ToK-KOORDYNACJA)
3. EC 6th FP INCO-CT-2003-003355 SURUZ [2004-2007] **121**
Scientific Network "Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practise (SSA-KOORDYNACJA)
4. EC 6th FP NMP-CT-2004-510318 POL-CAT [2004-2007] **122**
Annual Polish Conferences Are Setting Up a New Platform for Dissemination of Knowledge in the Field of Catalysis (SSA-KOORDYNACJA)
5. EC 6th FP NMP4-CT-2003-001428 NANOCAPS [2004-2007] **123**
Nanocapsels for Targeted Controlled Delivery of Chemicals (STREP)
6. EC 6th FP SSPI-CT-3003-501837 NOAH'S ARK [2004-2008] **124**
Global Climate Change Impact on Built Heritage and Cultural Landscapes (STREP)
7. EC 6th FP NMP2-CT-2004-505834 CONCORDE [2004-2007] **125**
Co-ordination of Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in Europe (CA)
8. EC 6th FP ERAC-011784 ACENET ERA-NET [2004-2008] **126**
ERA-NET for Applied Catalysis in Europe (CA)
9. EC 6th FP NMP2-011730-2 IDECAT [2005-2008] **127**
Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production (NoE)

Inne projekty badawcze UE

1. EC EUREKA Initiative E! CHLORCAT [2005-2006] **131**
Catalytic Cleaning of the Gases from Chlorinated Hydrocarbons

PROJEKTY FUNDUSZY STRUKTURALNYCH UE

- | | |
|--|------------|
| 1. SPO WKP 1.4.1. [2005-2008]
Wdrożenie technologii cementu romańskiego do praktycznej konserwacji zabytków | 135 |
|--|------------|

POLSKO-UKRAIŃSKIE LABORATORIUM KATALIZY

- | | |
|--|------------|
| 1. Utlenianie n-pentanu | 139 |
| 2. Utlenianie CO na Katalizatorach Co naniesionych na węgiel | 140 |
| 3. Mechanochemiczne przygotowanie katalizatorów tlenkowych | 141 |

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2005

W ROKU 2005:

realizowano:	8 tematów statutowych – 31 zadań badawczych 30 projektów badawczych (grantów) KBN-MNiI-MEiN (w tym 13 promotorskich i 1 zamawiany) 12 projektów Unii Europejskiej (w tym 6 projektów koordynowanych przez Instytut) 1 projekt Eureka E! 1 projekt Funduszy Strukturalnych Unii Europejskiej
opublikowano:	2 podręczniki 5 rozdziałów w monografiach i prac przeglądowych 54 prace naukowe w czasopismach naukowych o cyrkulacji międzynarodowej 8 prac popularno-naukowych i w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji 36 prac w recenzowanych materiałach konferencyjnych 237 referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	1 podręcznik dla Międzynarodowego Studium Doktoranckiego 6 książkowych materiałów konferencyjnych (z numerami ISBN)
wyłożono i zaprezentowano:	140 referatów i komunikatów (w tym 30 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 188 posterów
uzyskano patenty: zgłoszono do ochrony:	2 (w tym 1 zagraniczny) 1 zgłoszenie patentowe zagraniczne
we współpracy z zagranicą:	realizowano 27 tematów (w tym 3 Polsko-Ukraińskiego Laboratorium Katalizy) opublikowano 21 wspólnych prac w czasopismach naukowych ogłoszono 54 komunikaty w materiałach konferencyjnych uzyskano 1 wspólny patent zrealizowano 207 wyjazdów pracowników Instytutu za granicę z zagranicy przyjechało 41 osób
zorganizowano:	11 konferencji i posiedzeń naukowych Dzień Otwarty Instytutu stoisko na Festiwalu Nauki
stopień doktora:	uzyskały 4 osoby

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2005:

Nowe katalizatory do preferencyjnego (selektywnego) utleniania CO w mieszaninie z wodorem

(prof. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr Małgorzata Ruszel)

Znaleziono nowe, obiecujące katalizatory na osnowie nanocząstek złota do reakcji selektywnego utleniania CO w mieszaninie z wodorem. Reakcja ta ma istotne znaczenie dla oczyszczania przemysłowego wodoru (zawierającego do 2% CO), służącego jako paliwo w nowych źródłach energii - ogniwach paliwowych. Ślady CO działają jako trucizna elektrod ogniw. Nowością w katalizatorach jest zastosowanie chromitów metali przejściowych jako nośników nanocząstek Au, które pełnią rolę fazy aktywnej. Wcześniejsze badania pokazały wysoką aktywność układów Au/chromity Co, Mn w reakcji utleniania samego CO. Badania ostatnich miesięcy wykazały, że układy nanocząstek Au zdyspergowane na chromitach Co, Cu, Zn wykazują w niskich temperaturach (temp. pokojowa – 60⁰C) w obecności nadmiaru wodoru (H₂/CO=5) wyższą aktywność w utlenianiu CO, przy selektywności do CO₂ ~95%. Najlepsze wyniki otrzymano dla katalizatorów Au/CoCr₂O₄ (konwersja CO 85%, selektywność 98%) i Au/CuCr₂O₄ (konwersja CO 73%, selektywność 99%), temperatura 60⁰C. Wyniki te są lepsze niż dla najszerszej badanych w literaturze układów Au/MnO_x (konwersja CO 93%, selektywność 58% w 130⁰C) i Au/FeO_x (konwersja CO 98%, selektywność 53% w 50⁰C).

Wpływ szorstkości powierzchni hydrofobowej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz-ciecz-ciało stałe

(prof. Kazimierz Małyśa, mgr Marta Krasowska, dr Marcel Krzan, mgr Jan Zawala, inż. Marta Barańska)

Wykazano po raz pierwszy, że, wbrew powszechnie przyjętym opiniom, wysoka hydrofobowość powierzchni nie jest warunkiem wystarczającym do utworzenia trwałego kontaktu trójfazowego (TPC) i przyczepienia bańki w trakcie 1-szej kolizji. Stwierdzono, że szorstkość powierzchni hydrofobowej ma decydujący wpływ na kinetykę utworzenia TPC i przyczepienia bańki. Gdy szorstkość powierzchni była poniżej 1µm następowało wielokrotne odbicie, natomiast przy szorstkości większej od 50 µm przyczepienie następowało w trakcie pierwszej kolizji. Wyniki te mają fundamentalne znaczenie dla zrozumienia mechanizmu elementarnego aktu flotacji i mogą mieć istotne implikacje dla poprawy efektywności rozdziału flotacyjnego.

Opis adsorpcji surfaktantów kationowych w obecności elektrolitów

(mgr Grażyna Para, mgr Ewelina Jarek, inż. Marzena Noworyta, doc. Piotr Warszński)

Wykazano, że opracowany przez autorów nowy model adsorpcji surfaktantów jonowych, uwzględniający możliwość penetracji jonów elektrolitu do warstwy adsorpcyjnej, w odróżnieniu od modeli stosowanych dotychczas, pozwala na wyjaśnienie wpływu rodzaju i siły jonowej elektrolitu na adsorpcję surfaktantów kationowych. Przeprowadzono systematyczne pomiary napięć powierzchniowych dla szerokiego zakresu stężeń surfaktantów kationowych z grupy TAB i w obecności różnych elektrolitów (KF, KCl, KBr, KNO₃, KI, KClO₄, CH₃COOK). Na podstawie uzyskanych wyników stwierdzono, że silną zależność napięcia powierzchniowego od rodzaju elektrolitu można tłumaczyć zróżnicowaną zdolnością jonów do penetracji warstwy adsorpcyjnej związaną z ich różną polaryzowalnością. Należy podkreślić, że układy zawierające surfaktanty kationowe, aczkolwiek często opisywane w literaturze, nie były dotychczas badane w obecności tak szerokiego spektrum elektrolitów

a wyniki były interpretowane jedynie na podstawie fenomenologicznych modeli, których parametry nie były powiązane ze strukturą cząsteczek.

Wpływ podstawników w metaloporfirynach na ich aktywność katalityczną w reakcji utleniania cyklooktanu ditlenem

(dr Jan Połtowicz, mgr Edyta Tabor, dr inż. Katarzyna Pamin, prof. Jerzy Haber)

Wykazano po raz pierwszy, że zarówno podstawniki elektronoakceptorowe jak i podstawniki elektronodonorowe w makrocyklicznym ligandzie porfiryńowym przyspieszają reakcję utleniania cyklooktanu ditlenem pod wysokim ciśnieniem bez potrzeby użycia ko-katalizatora. Podstawniki elektronodonorowe modyfikują stałą szybkości inicjacji łańcuchowej reakcji utleniania, natomiast podstawniki elektronoakceptorowe wpływają na wartość stałej szybkości rozwinięcia łańcucha. Wykazano ponadto, że kompleksy μ -oxo porfiryń tworzące się w trakcie reakcji wykazują znacznie mniejszą aktywność i są odpowiedzialne za dezaktywację porfiryń, ale wprowadzenie podstawników zwiększa ich aktywność katalityczną i kompensuje dezaktywujące działanie.

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2005:

Prace organizacyjne

W roku 2005 zorganizowano 11 konferencji i posiedzeń naukowych, serie wykładów w ramach działalności Centrum Doskonałości CATCOLL oraz Dzień Otwarty Instytutu i stoisko na Festiwalu Nauki.

Działalność popularyzatorska

Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 25 października 2005

Główną ideą zorganizowania w dniu 25 października 2005, corocznego, czwartego 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 800 osób. Odwiedzający mieli okazję wysłuchać następujące wykłady: "Małe jest piękne, czyli co mogą koloidy" (prof. Z. Adamczyka), "Wodór - przyjazne dla środowiska paliwo przyszłości" (prof. A. Bielańskiego), "Chemia – przekleństwo czy błogosławieństwo ludzkości?" (prof. J. Habera), "Czy można zobaczyć atomy?" (prof. J. Koreckiego), "O Albercie Einsteinie, czyli jak jeden naukowiec, w jeden rok zrewolucjonizował wiedzę o świecie" (dr D. Rutkowskiej-Żbik) i "1000 sposobów na nieśmiertelność" (mgr M. Szaleńca). W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu: Od prekursora do dobrego katalizatora, Różne poziomy patrzenia, Adsorpcja i jej zastosowania, Bezpłomieniowa kuchenka gazowa, Swingtherm – skuteczna i ekonomiczna metoda katalitycznego oczyszczania powietrza z zanieczyszczeń emitowanych przez przemysł, Liofilizacja – katalizator o zwiększonej porowatości, kawa rozpuszczalna i jedzenie dla kosmonauty, Minerale w ochronie zdrowia i środowiska naturalnego, Czym można zastąpić krew – czyli rozpuszczalniki fluorowe w katalizie homogenicznej, "Daktyloskopia" chemiczna, Po co badać procesy osadzania?, Kiedy powierzchnie lubią wodę?, Świat w skali nanometrów, Powierzchnia, cienkie warstwy i nanostruktury, Zjawisko fotoelektryczne w metalach, Efekt fotoelektryczny

w półprzewodnikach, czyli energia ze słońca, Pomiar potencjału elektrycznego metodą wibrującej płytki, Cement romański – tajemnica krakowskich kamienic, Temperatura, ciepło i my, Ciekawe doświadczenia chemiczne. Kilkakrotnie wyświetlono filmy z cyklu „Nauka ratuje zabytki” ilustrujące zaangażowanie Instytutu w prace konserwatorskie prowadzone w zabytkowej Kopalni Soli w Wieliczce i w Mauzoleum Piastów Śląskich w Krzeszowie.

Wykłady popularno-naukowe

1. J. Korecki "Promieniowanie synchrotronowe", obóz dla dzieci szczególnie uzdolnionych, Warszawa-Świder 2005
2. R. Kozłowski "Cement romański – tajemnice krakowskich kamienic", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
3. E. Serwicka "Goethe – poeta czy naukowiec?", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
4. M. Szaleniec "Alchemia - wiedza tajemna, magia, czy nauka?", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
5. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Język Alchemii", Krakon 2005, Kraków 2005
6. P. Warszyński "Nano- i mikrocząstki w naszym otoczeniu", Otwarty Uniwersytet Techniczny AGH
7. M. Zembala "Koloidy, czyli fascynujący świat małych cząstek", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych

1. ACENET ERA-NET Meeting, Kraków, 16-17 lutego 2005 (E. M. Serwicka)
2. 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 15-18 marca 2005 (B. Sulikowski)
3. Warsztaty "Ogrzewanie budowli zabytkowych", Muzeum Narodowe, Warszawa, 13-14 kwietnia 2005 (R. Kozłowski)
4. KSV Instruments Ltd, CATCOLL and SURUZ Workshop "Technologies for Characterization of Liquid and Solid Interfaces", Kraków, 18-19 maja 2005 (P. Warszyński)
5. International Symposium "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", 22-25 maja 2005 (P. Warszyński)
6. SURUZ Network Meeting, Kraków, 15 lipca 2005 (K. Małyś)
7. DYNASYNC Mid-Term Assessment, Grenoble, 20-24 września 2005 (J. Korecki)
8. ACENET ERA-NET Meeting, Kraków, 26 października, 2005 (E. M. Serwicka)
9. DYNASYNC Scientific Meeting, Kraków, 8-9 listopada 2005 (J. Korecki)
10. "The Last CATCOLL Meeting" and SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków, 14-15 listopada 2005 (P. Warszyński, K. Małyś)
11. International Symposium "Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities", Kraków, 17-19 listopada 2005 (B. Grzybowska-Świerkosz, M. Witko)
12. wykłady Centrum Doskonałości CATCOLL 23 marca i 20 maja 2005 (doc. P. Warszyński)

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

1. Innowacyjne katalizatory do przeróbki węglowodorów

1.1. Utleniające odwodornienie propanu i etanu na układach CrO_x/nośnik tlenkowy domieszkami; porównanie z reakcją izobutanu

(prof. dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr inż. Katarzyna Samson, tech. Irena Gressel)

Celem badań było porównanie właściwości katalitycznych w reakcjach utleniającego odwodornienia, UOW, propanu i etanu katalizatorów z układu CrO_x/nośnik tlenkowy, niedotowanych i domieszkowanych potasem, z ich właściwościami katalitycznymi w reakcji UOW izobutanu, a także zbadanie wpływu potasu na aktywność katalityczną w danej reakcji i selektywność do odpowiedniej olefiny.

Wcześniejsze badania wykazały, że katalizatory CrTi i CrAl są aktywne i selektywne do izobutenu w reakcji UOW izobutanu. Ponadto stwierdzono dla w/w układów przeciwstawny wpływ potasu na selektywność do izobutenu: dla CrTiK zaobserwowano wzrost selektywności o 20% w porównaniu z próbką niedotowaną, a dla CrAlK obniżenie selektywności o 10% w porównaniu z CrAl.

W roku 2005 rozszerzono badania o reakcje UOW etanu i propanu na wybranych katalizatorach z układu CrO_x/nośnik tlenkowy.

Na podstawie przeprowadzonych badań fizykochemicznych (XRD, Raman, XPS) stwierdzono, że katalizatory te zawierają polimeryczne formy Cr⁺⁶O_x oraz niewielkie ilości Cr₂O₃.

Badania reakcji UOW prowadzą do następujących wniosków:

1. UOW niższych alkanów C₂-C₄ na układach CrO_x/nośnik tlenkowy zależy od rodzaju alkanu:
 - a. dla izobutanu dominującą reakcją jest utleniające odwodornienie do izobutenu, dla etanu i propanu główną reakcją jest całkowite utlenianie do tlenków węgla
 - b. reakcja UOW izobutanu przebiega według mechanizmu równoległo-następczego; w przypadku UOW etanu i propanu tlenki węgla powstają głównie na drodze równoległej
 - c. szereg aktywności katalitycznej dla próbek niedotowanych (wyrażonej jako temperatura 6 % konwersji alkanu, T₆; [wartości podane w nawiasach]) przedstawia się następująco:

$$C_4H_{10} (250^{\circ}C) > C_3H_8 (280^{\circ}C) > C_2H_6 (300^{\circ}C)$$
 i wskazuje na fakt, że etapem limitującym reakcji jest zerwanie wiązania C-H
2. wpływ potasu na aktywność katalityczną i selektywność do odpowiedniej olefiny jest zróżnicowany i zależy zarówno od rodzaju alkanu, jak i od rodzaju nośnika:
 - a. dla układu CrAl dodatek potasu obniża selektywność do odpowiedniej olefiny dla reakcji wszystkich trzech alkanów; dla układu CrTi potas podnosi selektywność do izobutenu i etenu a nie wpływa na selektywność do propenu
 - b. dla obu układów CrAl i CrTi dodatek potasu obniża aktywność w reakcji UOW etanu i nie ma wpływu na aktywność katalityczną w reakcjach UOW izobutanu i propanu.

Wyniki badań katalitycznych porównano w tabeli.

Katalizator 1 mw Cr ₂ O ₃ / S _{SA} [m ² /g]	UOW iC ₄ H ₁₀			UOW C ₃ H ₈			UOW C ₂ H ₆		
	T _r [°C]	kon. [%]	sel.iC ₄ = [%]	T _r [°C]	kon. [%]	sel.C ₃ = [%]	Tr [°C]	kon. [%]	sel. C ₂ = [%]
CrTi / 22	320	10.4	26	320	11	12	320	10.8	3.0
CrTiK	320	11	47	320	9.4	11	350	11	14.4
CrAl / 111	280	6	60	320	30	10	300	8.9	6.8
CrAlK	280	6.2	50	320	30	6	320	11	2.3

1.2. Efekt domieszek różnych metali alkalicznych do katalizatorów VO_x/SiO_2 i VO_x/MgO na właściwości katalityczne w reakcji utleniającego odwodornienia propanu, oraz rozkładu izopropanolu (reakcji-sondy właściwości kwasowo-zasadowych)

(prof. dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr inż. Anna Klisińska, tech. Irena Gressel)

Badano efekt domieszek, (A) alkaliów (Li, K, Na, Rb) i ziem alkalicznych (Ca, Mg) na właściwości katalityczne w reakcji utleniającego odwodornienia (UOW) propanu katalizatorów na osnowie tlenków wanadu, zdyspergowanych na tlenkach o różnej naturze: a) kwaśnym SiO_2 (na którym V_2O_5 , o silnych właściwościach kwasowych, jest główną fazą zawierającą V), [katalizatory VSi], b) zasadowym MgO (na którym cienka warstwa $\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$, o słabej kwasowości jest fazą aktywną [katalizatory VMg]).

Zakres pracy obejmował:

- syntezę katalizatorów (1.5 mnw V_2O_5 , A/V = 0.1),
- charakterystykę (techniki XRD, XPS, rozkład izopropanolu [reakcja sonda właściwości kwasowo-zasadowych]),
- badania desorpcji K z powierzchni katalizatorów (we współpracy z dr hab. A. Kotarba, UJ),
- testy katalityczne (reaktor ze stałym złożem, 400-520°C).

Główne wyniki pracy:

- Wprowadzenie powyższych domieszek do katalizatorów VSi powoduje:
 - wzrost selektywności do propenu (max. $S_{10} \sim 70\%$, Y $\sim 15\%$),
 - obniżenie aktywności właściwej (korelujące [dla alkaliów] ze wzrostem elektroujemności domieszek i wzrostem promienia jonowego,
 - znaczne obniżenie kwasowości i wzrost zasadowości (brak jednakże korelacji między selektywnością a właściwościami kwasowo-zasadowymi w obrębie serii).
- Dla układu VMg wprowadzenie domieszek prowadzi do:
 - obniżenia selektywności do propenu (z wyjątkiem Ca),
 - obniżenia aktywności właściwej,
 - obniżenia kwasowości.
- Znaczne różnice obserwuje się między właściwościami katalizatorów VSi i VMg oraz wpływem domieszek do obu serii katalizatorów. Polegają one na:
 - przeciwnym wpływie domieszek na selektywność do propenu (wzrost dla VSi, obniżenie dla VMg),
 - przewadze CO_2 nad CO dla katalizatorów VMgA i CO nad CO_2 dla katalizatorów VSiA,
 - dominującym udziale reakcji następczych w tworzeniu CO_x na VSiA i równoległym mechanizmie reakcji dla VMgA,
 - wyższych energiach desorpcji K z układu VMgK w porównaniu z VSiK (co jest równoważne z wyższymi wartościami pracy wyjścia elektronu i pośrednio z większym stężeniem elektrofilowych, nieselektywnych form tlenu na powierzchni katalizatorów VMg).

Część wyników badań opracowano w postaci publikacji (wysłanej do druku w Polish J. Chem.).

1.3. Synteza nowych typów heteropolikwasów

(prof. dr Adam Bielański, dr Anna Lubańska, dr Anna Micek-Ilnicka)

W roku 2005 jako temat nowy przyjęto badanie soli heteropolikwasu typu Wellsa-Dawsona w reakcjach kwasowo – zasadowych. Badania opisane dotąd w literaturze prowadzono niemal wyłącznie na solach dodekaheteropolikwasów typu Keggina, bardzo niewiele uwagi poświęcając solom typu Wellsa-Dawsona. Ten kierunek badań może prowadzić do uzyskania katalizatorów nadających się do użycia nie tylko w fazie gazowej, ale również w fazie ciekłej. W odróżnieniu od czystych heteropolikwasów, dobrze rozpuszczalnych w wodzie i w licznych rozpuszczalnikach organicznych, niektóre sole są trudno rozpuszczalne, a więc łatwe do oddzielenia od fazy ciekłej, w której zachodzi reakcja. Jako obiekty badań wybrano sól cezową $Cs_xH_{6-x}P_2W_{18}O_{62}$ oraz sól srebrową $Ag_6P_2W_{18}O_{62}$ częściowo zredukowaną.

W szeregu soli Keggina $Cs_xH_{3-x}PW_{12}O_{40}$ opisanych w literaturze wielu autorów stwierdzało wyraźne maksimum aktywności przy składzie bliskim $Cs_{2.5}H_{0.5}PW_{12}O_{40}$ związane zarówno dobrze rozwiniętą powierzchnią właściwą jak i zwiększoną aktywnością centrów kwasowych Brönsteda. Celem naszych badań było stwierdzenie czy analogiczne efekty pojawiają się również w przypadku soli Wellsa-Dawsona. Szereg soli $Cs_xH_{6-x}P_2W_{18}O_{62}$ o wartościach $x = 0, 2, 4, 5, 5.5, 6$ otrzymano przez częściowe zobojętnienie roztworu wodnego $H_6P_2W_{18}O_{62}$ węglanem cezu i odparowanie pozostałej cieczy wraz z osadem na łaźni wodnej. Jako reakcje testową wybrano syntezę eteru etylo-tert-butyłowego z etanolu i izobutenu, w fazie gazowej w 40 °C. Stwierdzono, że aktywność katalityczna odniesiona do masy katalizatora maleje równolegle z obniżaniem się zawartości niezobojętnionego heteropolikwasu. Aktywność odniesiona do masy heteropolikwasu wykazuje wyraźne maksimum przy wartości $x = 5$, co wskazuje na aktywację niewielkich ilości niezobojętnionego heteropolikwasu. W porównaniu z analogicznymi solami Keggina wytrąconymi w tych samych warunkach, uzyskane przez nas preparaty wykazują małą powierzchnię właściwą (poniżej $1 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$), co przypisano rekryształizacji osadu wytrącającego się w pierwszej chwili w postaci mlecznej zawiesiny. Próby uzyskania katalizatora o większej powierzchni przez skrócenie czasu kontaktu z roztworem wodnym oraz przez zmianę rozpuszczalnika z wody na metanol i etanol dały jak dotąd tylko wzrost powierzchni do około $1.6 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$.

Sól srebrowa $Ag_6P_2W_{18}O_{62}$ otrzymana przez wytrącenie z roztworu wodnego była w stanie surowym nieaktywna w syntezie ETBE. Znaczną aktywność uzyskiwała dopiero po częściowej redukcji parami metanolu w czasie której najprawdopodobniej zachodzi reakcja:



prowadzącą do wydzielania srebra na stopniu utlenienia 0, oraz utworzenia pewnej liczby centrów kwasowych typu Brönsteda. Aktywność uzyskana w ten sposób jest porównywalna do aktywności krystalicznego heteropolikwasu. Otrzymany wynik wskazuje na możliwość uzyskania tą drogą dobrego katalizatora.

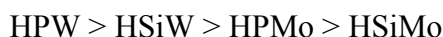
1.4. Wpływ struktury heteropolikwasu naniesionego na krzemionkę lub Al_2O_3 na selektywność i wydajność reakcji uwodnienia propylenu

(dr Katarzyna Pamin, prof. dr hab. Jerzy Haber)

Heteropolikwasy są znanymi katalizatorami wykazującymi wysoką aktywność katalityczną i selektywność w reakcji uwodnienia alkenów. W zależności od rodzaju użytego heteropolikwasu i typu nośnika ich aktywność katalityczna powinna ulegać zmianom. Ta różnica w aktywnościach jest głównie związana z różnicami w aktywności protonów lub mocy kwasowej poszczególnych heteropolikwasów. Rodzaj nośnika również znacząco wpływa na aktywność katalityczną.

Celem tych badań było określenie aktywności katalitycznej heteropolikwasów: fosfowolframowego (HPW), fosfomolibdenowego (HPMo), krzemowolframowego (HSiW) i krzemomolibdenowego (HSiMo) osadzonych na nośnikach tlenkowych (SiO_2 , $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$) w reakcji uwodnienia propylenu. Uwadnianie jest ważnym procesem przemysłowym, w wyniku którego otrzymuje się tlenowe związki organiczne. Reakcja uwadniania olefin zachodzi w obecności protonów z utworzeniem odpowiednich karbokationów, które mogą reagować z wodą. Reakcja uwadniania olefin jest reakcją równowagową zachodzącą w fazie gazowej, w stosunkowo wysokich temperaturach rzędu 200-300°C i pod ciśnieniem 25-70 atm. Reakcja uwadniania propylenu prowadzi do powstania izopropanolu i acetonu. Mieszanina poreakcyjna może również zawierać ślady eteru diizopropylowego. Heteropolikwasy były osadzone na specjalnie preparowanej krzemionce płomieniowej o granulacji 3.5 mm oraz na tlenku glinu o granulacji 2.5 mm i testowane w reakcji uwadniania propylenu prowadzonej w stacjonarnym reaktorze ciśnieniowym przy stosunku molowym $\text{C}_3\text{H}_6:\text{H}_2\text{O} = 1.3:1$, w temperaturze 240°C i przy ciśnieniu 33 atm. przez 2 godziny.

Wszystkie badane katalizatory są aktywne w tej reakcji. Najbardziej aktywnym katalizatorem jest kwas fosfowolframowy osadzony na krzemionce, wykazujący najmocniejsze właściwości kwasowe spośród badanych heteropolikwasów. W serii heteropolikwasów osadzonych na krzemionce aktywność katalityczna obniża się w szeregu:



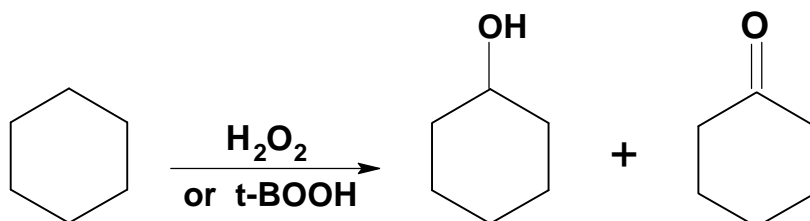
co jest zgodne z kierunkiem spadku mocy kwasowej. W przypadku heteropolikwasów naniesionych na Al_2O_3 najbardziej aktywne są heteropolikwasy HPMo i HSiMo. Naniesienie kwasu HPW na Al_2O_3 powoduje dwukrotny spadek jego aktywności w porównaniu z tym kwasem osadzonym na krzemionce. Nanoszenie HPW na nośniki powoduje obniżenie jego mocy kwasowej, przy czym jest ono większe w przypadku Al_2O_3 niż SiO_2 . Natomiast aktywność katalityczna kwasów HSiMo i HPMo po naniesieniu na Al_2O_3 wzrasta w porównaniu z aktywnością tych heteropolikwasów osadzonych na krzemionce.

1.5 Badanie aktywności katalitycznej ftalocyjan kobaltu, manganu i żelaza z różnymi podstawnikami w pierścieniu kompleksu w reakcji hydroksylacji węglowodorów z różnymi donorami tlenu

(dr Jan Poltowicz, prof. dr hab. Jerzy Haber, mgr Edyta Tabor)

Syntetyczne metaloporfiryny są szeroko stosowane jako związki modelowe pozwalające naśladować działanie monooxygenaz, np. cytochromu P-450 i jako katalizatory procesów utleniania węglowodorów. Metaloporfiryny są katalizatorami drogimi i trudnymi do syntezy. Metaloftalocyjaniny należą do klasy syntetycznych makrocyklicznych związków o strukturze podobnej do metaloporfiryn. W niniejszej pracy zastosowano kompleksy ftalocyjaninowe jako niedrogie i łatwe do otrzymania analogi metaloporfiryn.

Celem zadania badawczego było określenie właściwości katalitycznych ftalocyjanin kobaltu, żelaza, manganu, miedzi i niklu I i II generacji: prostych metaloftalocyjanin bez podstawników MnPc, FePc, CoPc, NiPc i CuPc, halogenowanego kompleksu $\text{FeCl}_{16}\text{Pc}$ oraz kompleksów ftalocyjaninowych z podstawnikami nitrowymi w makrocyklicznym pierścieniu: $\text{Mn}(\text{NO}_2)_4\text{Pc}$, $\text{Fe}(\text{NO}_2)_4\text{Pc}$, $\text{Co}(\text{NO}_2)_4\text{Pc}$. Użyto ich jako katalizatorów hydroksylacji węglowodorów cyklicznych w fazie ciekłej: cykloheksanu i cyklooktanu. Jako donory tlenu zastosowano wodoronadtlenek tertbutylowy lub wodę utlenioną. Reakcję prowadzono w temperaturze pokojowej w acetonitrylu. Wszystkie badane ftalocyjaniny wykazywały aktywność katalityczną w procesie utleniania cykloalkanów. Produktami utlenienia cykloalkanów były cykloketony i cykloalkohole.



Największą aktywność katalityczną wykazywała halogenowana ftalocyjanina żelaza $\text{FeCl}_{16}\text{Pc}$, zarówno w przypadku użycia wody utlenionej, jak i wodoronadtlenku ftalocyjanina, która posiadała najwięcej podstawników silnie ściągających elektrony z pierścienia ftalocyjaninowego. Stwierdzono również, że ftalocyjaniny $\text{Mn}(\text{NO}_2)_4\text{Pc}$, $\text{Fe}(\text{NO}_2)_4\text{Pc}$, $\text{Co}(\text{NO}_2)_4\text{Pc}$ z podstawnikami nitrowymi wykazują większą aktywność katalityczną niż metaloftalocyjaniny bez podstawników. Stosunek produktów reakcji, t.j. cykloketonu do cykloalkoholu wynosiło prawie jeden dla wszystkich badanych katalizatorów, inaczej niż w przypadku metaloporfiryn.

Wiadomo, że wprowadzenie podstawników silnie ściągających elektrony do pierścienia porfirynowego powoduje wzrost aktywności katalitycznej metaloporfiryn. Ten sam efekt obserwowany jest w przypadku kompleksów metalftalocyjaninowych. Aktywność katalityczna metaloftalocyjanin zależy od rodzaju centrum metalicznego i od struktury ligandu ftalocyjaninowego.

1.6. Badanie mechanizmu adsorpcji i dysocjacji wodoru na powierzchniach katalizatorów do przeróbki węglowodorów

(prof. dr hab. Władysław Rudziński, dr Tomasz Pańczyk)

W ramach realizacji zadania statutowego przeprowadzono badania mechanizmu adsorpcji i dysocjacji wodoru na powierzchni nikielu, który jest fazą aktywną katalizatorów reformingu parowego węglowodorów. Badania polegały na przeprowadzeniu symulacji Monte Carlo różnych wersji dysocjatywnej adsorpcji wodoru na powierzchni Ni(100) a następnie porównaniu uzyskanych wyników teoretycznych z danymi eksperymentalnymi. Dzięki temu udało się znaleźć najbardziej prawdopodobny mechanizm tego procesu. Mechanizm ten można streścić następująco: dysocjacja następuje, gdy środek ciężkości molekuly wodoru znajduje się nad atomem nikielu (pozycja top, TP), wówczas atomy wodoru adsorbują się na dwóch diagonalnie zorientowanych miejscach typu hollow (HL) lub miejscach typu bridge (BR) zorientowanych tak jak molekula wodoru. Przy czym dysocjacja może nastąpić tylko wtedy, gdy w bezpośrednim sąsiedztwie adsorbujących się atomów wodoru nie ma zaadsorbowanych wcześniej atomów. Po dysocjacji i adsorpcji atomy wodoru mogą dyfundować po powierzchni bez ograniczeń związanych z lokalnym obsadzeniem miejsc adsorpcyjnych. Przy czym prawdopodobieństwo dyfuzji zostało określone jako równe 0.04 (4% kroków dyfuzyjnych na 96% kroków desorpcyjnych), co oznacza, że dyfuzja atomów wodoru nie jest w pełni swobodna. Na podstawie powyższego mechanizmu adsorpcji wodoru na powierzchni Ni(100) wyznaczony został potencjał chemiczny fazy zaadsorbowanej, który został użyty do wyznaczenia krzywych kinetycznych przy zastosowaniu podejścia SRT (Statistical Rate Theory). Uzyskano bardzo dobrą zgodność teoretycznych krzywych kinetycznych adsorpcji wodoru z danymi eksperymentalnymi. Powyższe wyniki zostały opublikowane w czasopiśmie *Journal of Physical Chemistry B*. (Pańczyk T., Szabelski P., Rudziński W., *J. Phys. Chem. B*, 109 (2005) 10986).

Dzięki wynikom uzyskanym w powyższym artykule możliwe było zaproponowanie metody analizy ilościowej widm termodesorpcji wodoru z powierzchni katalizatorów niklowych, opartej na zastosowaniu SRT. Zastosowanie tej metody do analizy serii katalizatorów niklowych ze zmodyfikowanym składem nośnika (dodatkiem tlenku magnezu) pozwoliło na zidentyfikowanie ilości i charakteru energetycznego miejsc aktywnych na powierzchniach tych katalizatorów, oraz określenie wpływu ilości modyfikatora (MgO) na rozkład energii adsorpcji wodoru. Wyniki tych badań opublikowano w czasopiśmie *Langmuir* (Pańczyk T., Gac W., Pańczyk M., Dominko A., Borowiecki T., Rudziński W., *Langmuir* 21 (2005) 7311).

2. Fizykochemia metalicznych i tlenkowych monowarstw i nanoklasterów

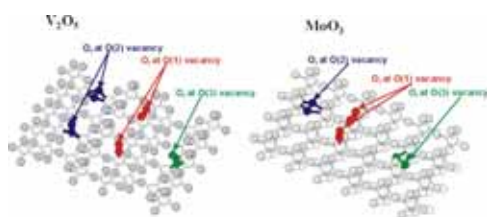
2.1. Kwantowo-chemiczne badania reutlenionych powierzchni tlenków metali przejściowych

(prof. dr hab. Małgorzata Witko, dr Renata Tokarz, dr Robert Gryboś)

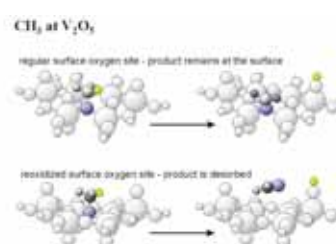
Wakacje tlenowe utworzone na powierzchni tlenków metali przejściowych w trakcie reakcji katalitycznej (mechanizm Marsa i van Krevelena), mogą stanowić punkt startowy wielu procesów powierzchniowych, w tym np. reutlenia. Proces ten zachodzić może poprzez dyfuzję jonów tlenowych z wnętrza sieci albo poprzez adsorpcję tlenu z fazy gazowej.

Teoretyczny opis procesu reutlenia przeprowadzono przy użyciu metody DFT i modelu klastrów. Obliczenia wykonano dla wskazywanych jako szczególnie aktywne powierzchni (010)V₂O₅ i (010)MoO₃, na których w miejscu różnych wakacji tlenowych adsorbowano cząsteczkę O₂ z fazy gazowej. Wyniki obliczeń pokazują, że cząsteczka tlenu łatwo adsorbuje się w miejscu wakacji (proces egzotermiczny), w efekcie na powierzchni pojawia się więcej centrów tlenowych niż w strukturze wyjściowej. Cząsteczka O₂ adsorbuje się na powierzchni tlenków zarówno w orientacji prostopadłej (energetycznie korzystniejsza), jak i równoległej, wypełniając w pierwszej kolejności wakacje najtrudniejsze do utworzenia, a więc wakację O(2) w V₂O₅ i O(1) w MoO₃ (Rys.1).

W wyniku adsorpcji cząsteczka O₂ ulega aktywacji; wiązanie O-O wydłuża się (z 1.24Å w izolowanej cząsteczce do ~1.5Å po adsorpcji) i osłabia (rzęd wiązania maleje z 1.87 w O₂ do ~1 po adsorpcji). Suma ładunków w zaadsorbowanej cząsteczce O₂ jest praktycznie równa ładunkowi jakie posiadał znajdujący się w tym węzle tlen sieciowy, co sugeruje, że ładunek poszczególnych centrów powierzchniowych jest ściśle określony ich pozycją krystalograficzną. Spośród wszystkich obecnych na płaszczyźnie centrów tlenowych atomy tlenu w zaadsorbowanej na powierzchni cząsteczce O₂ są najmniej nukleofilowe i wykazują różne właściwości; jeden jest związany z powierzchnią/cząsteczką bardzo słabo i łatwo ulega desorpcji. Wyznaczona energia desorpcji jednoznacznie wskazuje, że proces jest spontaniczny, w co najmniej 2 przypadkach: dla adsorpcji w miejscu wakacji O(2) i O(3) w układzie MoO₃ i wakacji O(3) w układzie V₂O₅. W pozostałych przypadkach desorpcja jonu tlenowego wymaga dostarczenia niewielkiej energii (około 2 eV) zwłaszcza w stosunku do energii desorpcji tlenu z powierzchni (około 7eV).



Rys. 1. Geometria molekuł O₂ zaadsorbowanych w miejscu wakacji tlenowych na powierzchni V₂O₅ i MoO₃.



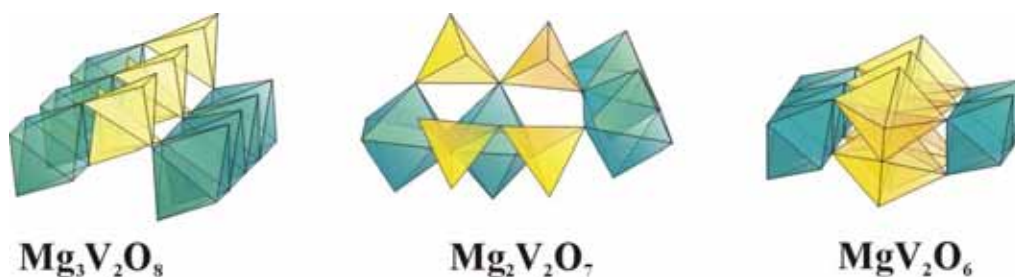
Rys. 2. Oddziaływanie rodnika CH₃ z powierzchnią (010)V₂O₅.

W celu porównania właściwości katalitycznych sieciowych i zaadsorbowanych centrów tlenowych, modelowano oddziaływanie rodnika CH₃ z tlenem podwójnie skoordynowanym i jednym z tlenów z cząsteczki zaadsorbowanej na wakacji tlenowej utworzonej w tym miejscu. Wyniki obliczeń pokazują, że oddziaływanie rodnika z podwójnie skoordynowanym tlenem sieciowym prowadzi do aktywacji wiązania C-H i powstają dwie powierzchniowe grupy O-CH₂ i O-H. Aktywacja wiązania C-H na tlenie z zaadsorbowanej cząsteczki jest procesem innym; zachodzi z mniejszą barierą energetyczną, a w jej wyniku powstaje powierzchniowa grupa O-H i następuje samorzutna desorpcja aldehydu metylowego (Rys. 2).

2.2. Wpływ koordynacji metalu centralnego na właściwości katalityczne układów V-Mg-O

(dr Renata Tokarz, prof. dr hab. Małgorzata Witko)

Aktywność i selektywność układów V-Mg-O używanych jako katalizatory w reakcjach utleniającego odwodornienia alkanów, związana jest ściśle z występowaniem konkretnej fazy z wielu, które różnią się między sobą stosunkiem V:Mg i obecnością rozmaitych ugrupowań wanadowo-tlenowych (izolowane lub łączone VO_4 , VO_6). Do teoretycznego opisu struktury elektronowej układów wybrane zostały najczęściej używane w procesach katalitycznych: ortowanadan magnezu, $\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$, (izolowane tetraedry VO_4 i oktaedry MgO_6), pyrowanadan magnezu, $\alpha\text{-Mg}_2\text{V}_2\text{O}_7$ (połączone narożem dwa tetraedry V_2O_7 i oktaedry MgO_6) i metawanadan magnezu, $\beta\text{-MgV}_2\text{O}_6$ (oktaedry VO_6 i MgO_6) (Rys.1).



Rys. 1. Modele klasterowe opisujące strukturę układów V-Mg-O.

Badania teoretyczne wykonano przy pomocy metody DFT (Density Functional Theory) (program StoBe), a układy modelowano klasterami wyciętymi z powierzchni/objętości odpowiednich systemów chemicznych. Celem badań było określenie właściwości elektronowych powierzchniowych centrów aktywnych jako funkcji ich koordynacji i typu otoczenia (V/Mg).

Z przeprowadzonych obliczeń wynika, że silnie jonowy charakter wiązań Mg-O wymusza wzrost kowalencyjności wiązań V-O (w obrębie sfery koordynacji tlenów mostkowych, podwójnie i potrójnie skoordynowanych) w układzie V-Mg-O w porównaniu z czystym V_2O_5 . Obecność jonów Mg powoduje wzrost nukleofilowości tlenów pojedynczo skoordynowanych do V, których ładunek wzrasta z 0.33, w tlenku binarnym V-O, do około 0.45 w układach mieszanych V-Mg-O. Analiza ładunków tlenów mostkowych, dla trzech różnych układów wskazuje, że ładunek zależy nie tylko od liczby i charakteru chemicznego sąsiadów metalicznych, ale również od lokalnej geometrii. Ten sam typ tlenów O(3) (skoordynowany do dwóch atomów Mg i jednego atomu V) ma największy ładunek (-0.94) w układzie $\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$ jeśli sąsiadujący wanad jest w ugrupowaniu tetraedrycznym, a najmniejszy (-0.82 w układzie MgV_2O_6), gdy sąsiadujący wanad występuje w otoczeniu oktaedrycznym. Zależność ładunku od typu koordynacji widoczna jest również w przypadku jonu V, którego ładunek dodatni jest najmniejszy w izolowanych tetraedrach, ($\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$), a największy w jednostkach oktaedrycznych (MgV_2O_6). W stosunku do czystego tlenku V_2O_5 (ładunek na atomach wanadu równy +1.59), kwasowość centrów wanadowych w układach mieszanych maleje w układzie ortowanadanu magnezu, $\text{Mg}_3\text{V}_2\text{O}_8$ (+1.25), nieznacznie wzrasta w układzie metawanadanu magnezu, MgV_2O_6 (+1.63), a w przypadku pyrowanadanu magnezu, $\text{Mg}_2\text{V}_2\text{O}_7$, jest porównywalna z układem binarnym (+1.58). Charakterystyka gęstości stanów elektronowych w rejonie energii walencyjnej wskazuje na wzrost charakteru metalicznego układów wanadowo-magnezowych w szeregu:



2.3. Określenie kinetyki utleniającego odwodornienia propanu w warunkach stacjonarnych na katalizatorach VO_x/CeO_2 i $\text{KVO}_x/\text{CeO}_2$

(dr Ryszard Grabowski, tech. Irena Gressel)

Katalizatory zawierające wanad wykazują interesujące właściwości w reakcjach selektywnego utleniania węglowodorów w tym w reakcji utleniającego odwodornienia (ODH) alkanów, które to reakcje wzbudzają zainteresowanie ze względu na możliwość wykorzystania ich jako źródła tanich olefin. Jednym z takich katalizatorów jest tlenek wanadu naniesiony na CeO_2 , który jest aktywny selektywny w reakcji ODH propanu.

Dane doświadczalne będące podstawą obliczeń były otrzymane dla reakcji ODH propanu prowadzonej w reaktorze całkowym na katalizatorze 1mnlVCeO i 1mnlVKCeO w przedziale konwersji (X_p) $0 < X_p < 0.3$. Umożliwiło to wyznaczenie poszczególnych stałych szybkości dla szerokiego przedziału zmienności temperatury, stężenia propanu oraz czasu kontaktu.

Dwa modele ER-SSAM (Eley-Rideal - Steady State Adsorption Model) oraz MK (Mars van Krevelen) zostały zastosowane do opisu tej reakcji.

W poniższej tabeli zostały podane obliczone wartości aktywacji energii oraz czynnika przed-eksponencjalnego dla poszczególnych etapów reakcji ODH propanu, otrzymane poprzez dopasowanie tych modeli do danych doświadczalnych.

Model	Katalizator	Stała szybkości								Błąd [%]
		k_1		k_2		k_3		k_{os}		
		k_1^o	E_1	k_2^o	E_2	k_3^o	E_3	k_{os}^o	E_{os}	
ER-SSAM	VCeO	3740	(66)*	23300	(59)	1770	(63)	3187000	(81)	5.9
	KVCeO	246	(57)	38	(27)	600	(64)	722000	(84)	7.3
		k_{red}						k_{ox}		
MK	VCeO	30000	(75)	72300	(60)	-		3530000	(75)	11.4
	KVCeO	9590	(77)	3920	(51)	-		3460000	(82)	9.3

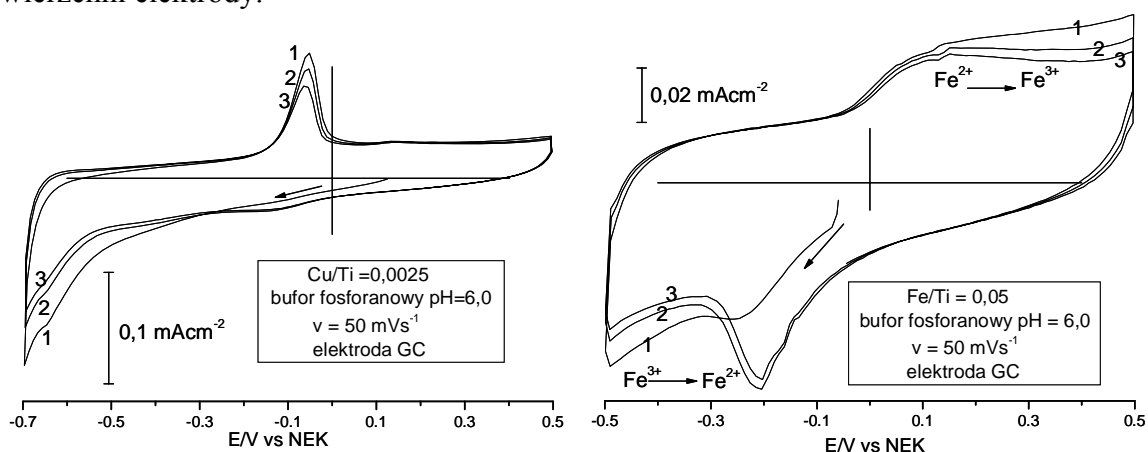
*energia aktywacji – kJ/mol

Jak wynika z tabeli, dla obydwu katalizatorów, dotowanego (KVCeO) jak i nie dotowanego (VCeO), model ER-SSAM lepiej opisuje ODH propanu niż model MK oraz dostarcza on więcej informacji na temat poszczególnych etapów reakcji. Model ten umożliwia analizę wpływu potasu na poszczególne etapy reakcji związane z redukcją jak i utlenianiem katalizatora. Dodatkowo obliczenia pokazały, że dodatek potasu nie wpływa na pokrycie katalizatora tlenem a więc praktycznie katalizator dotowany jak i niedotowany pracuje przy tym samym stopniu redukcji. Dodatek potasu prowadzi do zmniejszenia udziału następczego spalania propylenu, które jest głównym źródłem CO_x w reakcji ODH propanu, poprzez zmniejszenie współczynnika przedeksponencjalnego w stałej k_2 , co w rezultacie prowadzi do wzrostu selektywności do propylenu. W przypadku reakcji równoległej spalania propanu dodatek potasu ma mniejszy wpływ na współczynnik przedeksponencjalny w stałej k_3 . Zmniejszenie się współczynników przedeksponencjalnych we wszystkich etapach reakcji świadczy o blokowaniu poszczególnych centrów aktywnych poprzez potas i prowadzi do zmniejszenia aktywności katalitycznej katalizatora dotowanego potasem.

2.4. Przemiany utlenienia-redukcji metali przejściowych wbudowanych w strukturę TiO_2 i SiO_2 otrzymanych techniką zol-żel

(dr Paweł Nowak)¹

Przedmiotem badań była optymalizacja procedury otrzymywania oraz składu żeli ditlenku tytanu i ditlenku krzemu, otrzymywanych metodą zol-żel, w celu zastosowania ich w charakterze matrycy do immobilizacji katalizatorów biologicznych (enzymów), używanych między innymi w konstrukcji elektrod enzymatycznych do wykrywania związków fenolowych. Skład i właściwości żeli modyfikowano poprzez ich domieszkowanie jonami metali przejściowych, które mogłyby spełniać rolę mediatora redokсового oraz polepszać właściwości żeli poprzez zwiększenie ich trwałości czy przewodnictwa elektrycznego. W przyszłości planowane są również badania nad zastosowaniem żeli TiO_2 i SiO_2 domieszkowanych jonami metali przejściowych do preparatyki katalizatorów i modyfikacji powierzchni elektrod. Skupiono się na żelach ditlenku tytanu, gdyż żele ditlenku krzemu są bardzo obszernie opisane w literaturze. Żele ditlenku tytanu domieszkowane jonami metali (V, Mo, Ni, Cu, Ag, Sn, Co, Fe, Mn) sporządzano w ten sposób, że do roztworu zawierającego jony metalu wkraplano roztwór prekursora (tetraizopropanolan tytanu) w alkoholu izopropylowym, zawierający również katalizator, otrzymując stabilny zol TiO_2 . Zol mieszany był następnie z roztworem buforowym i nakładany na powierzchnie elektrody z platyny lub węgla szklanego (GC), gdzie następowało żelowanie. Żel zagęszczano poprzez częściowe odparowanie wody i poddawano badaniom metodami elektrochemicznymi. Preparatykę żeli SiO_2 opisano w jednym z poprzednich sprawozdań. Zachowanie się metalu w trakcie polaryzacji zależy od sposobu jego wbudowania w żel. Znaczne prądy związane z przemianami redokсовymi jonów metali obserwowano jedynie w przypadku metali, których jony nie wbudowują się w strukturę żelu, ale pozostają przede wszystkim w jego porach (na przykład Cu – patrz rysunek poniżej). Takie jony wykazują jednak w roztworze wodnym tendencje do ucieczki z żelu, co można stwierdzić obserwując zanikanie sygnału w kolejnych cyklach (1,2,3 na rysunku). Podobnie do miedzi zachowuje się srebro. Jony, które wbudowują się w strukturę żelu bądź to dają bardzo słaby sygnał (żelazo – patrz rysunek) bądź też praktycznie nie dają żadnego sygnału (V, Mo). Jak widać pomimo 20-krotnie wyższego stężenia metalu w żelu, w przypadku żelaza sygnał jest o wiele słabszy niż w przypadku miedzi. Powodem tego jest fakt, że sygnał elektryczny nie przenosi się przez strukturę żelu i reakcja elektrochemiczna przebiega przede wszystkim na powierzchni elektrody i w niewielkim stopniu w objętości żelu, ale tylko w bezpośredniej bliskości powierzchni elektrody.



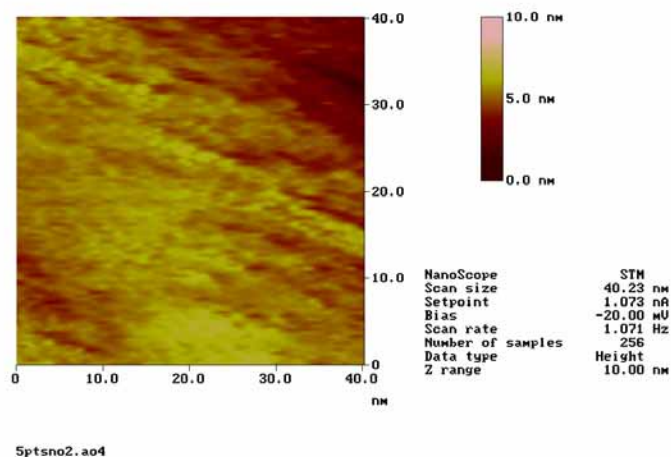
¹ W badaniach brali również udział studenci-dyplomanci Wydziału Chemii UJ: Michał Dziurka i Daria Czernek.

2.5. Badanie topografii powierzchni metali i tlenków w skali nanometrów

(dr Andrzej Kowak, inż. Katarzyna Kusak)

Rozwój wydajnych, przyjaznych środowisku ogniwi paliwowych wymaga przygotowania nowych materiałów elektrodowych. W okresie sprawozdawczym badano następujące materiały: Pt, Pt-Ru i Pt-Rh - czyste oraz pokryte klastkami SnO_2 w celu określenia ich możliwego zastosowania jako anod w niskotemperaturowych ogniwach paliwowych zasilanych etanolem (w literaturze anglojęzycznej oznaczanych DEFC - Direct Ethanol Fuel Cell). Wielkość, ilość oraz rozkład nanocząstek SnO_2 na powierzchni Pt, Pt-Ru oraz Pt-Rh wyznaczano stosując skaningową mikroskopię tunelową (STM) oraz mikroskopię sił atomowych (AFM).

Stwierdzono, że cyna zdeponowana na powierzchni monokrystalicznej platyny Pt(111) w ilości odpowiadającej 1 monowarstwie (stosunek atomów Sn:Pt równy 1:1), a następnie utleniona do nanocząstek SnO_2 obecnych na krawędziach Pt(111) [patrz poniżej] tworzy bardzo wydajny katalizator procesu elektrochemicznego utlenienia etanolu w roztworze 0,1 M HClO_4 .



Wielkości nanocząstek SnO_2 utworzonych na powierzchniach elektrod Pt, Pt-Ru i Pt-Rh zawarte są w zakresie 1.5 do 3.5 nm.

Prądy utlenienia etanolu, rejestrowane dla elektrod Pt/ SnO_2 w roztworach 0.1 M HClO_4 przy potencjale 0.15 V względem elektrody Ag/AgCl(3M Cl), wynoszą: 110, 150, 180, 170, 45, 40 mikroamperów/ cm^2 odpowiednio dla elektrody platynowej Pt pokrytej cyną w ilości: 0, 1/2, 1, 2, 5, 10 monowarstw (mw). Stwierdzono więc, że cyna znacznie ułatwia proces elektrochemicznego utlenienia etanolu w 0,1 molowym roztworze HClO_4 lecz tylko jeśli obecna jest na powierzchni Pt w małych ilościach (1mw) oraz w formie nanocząstek SnO_2 utworzonych na krawędziach nanowarstw Pt.

W dalszej części pracy badano wpływ dodatkowego metalu (Ru, Rh) na aktywność elektrody platynowej pokrytej nanocząsteczkami SnO_2 . Aktywność elektrody Pt(111) pokrytej 1 mw SnO_2 porównano z aktywnością elektrody Pt(111) pokrytej rutenem w ilości 0,3 mw, a następnie nanocząsteczkami SnO_2 w ilości 1 mw. Stwierdzono, że obecność rutenu na powierzchni elektrody nie przyspiesza procesu elektrochemicznego utlenienia etanolu w 0,1-molowym roztworze HClO_4 .

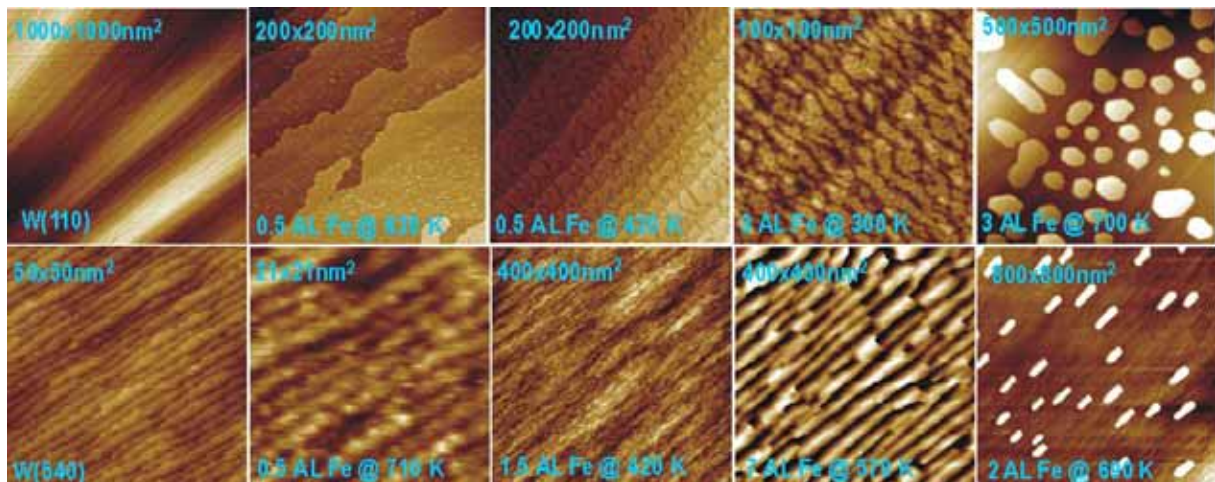
Przygotowano także elektrody Pt(111) pokryte rodem w ilości 0,3 monowarstw, a następnie pokryte nanocząsteczkami SnO_2 przy zachowaniu stosunku Sn:Pt w zakresie od 1/2 do 10. Obecnie prowadzone są badania aktywności tych elektrod stosowanych do elektrochemicznego utleniania etanolu w roztworach kwaśnych.

2.6. Wzrost i dyfuzja Fe na wycylnalnej powierzchni W(110)

(prof. dr hab. Józef Korecki, dr Nika Spiridis, dr Tomasz Ślęzak, mgr inż. Kinga Freindl)

Ultracienkie epitaksjalne warstwy żelaza na powierzchni wolframu o orientacji (110) wykazują wiele ciekawych właściwości strukturalnych i magnetycznych. Mimo stosunkowo dużego niedopasowania sieci żelaza i wolframu wynoszącego prawie 10%, warstwy Fe rosną w sposób niewiele odbiegający od warstwowego. W literaturze panuje pogląd, że monowarstwa Fe rośnie pseudomorficznie, chociaż brak jest systematycznych ilościowych badań dyfrakcyjnych, a skaningowa mikroskopia tunelowa (STM) nie daje obrazów z atomową rozdzielczością. Począwszy od drugiej lub trzeciej warstwy struktura relaksuje poprzez skomplikowane pole dyslokacji misfitowych. Istotną rolę w wzroście warstw odgrywa topografia powierzchni wolframu, a w szczególności stopnie, które ograniczają lateralny transport atomów. Wielkość tarasów, określona przez odchylenie powierzchni od płaszczyzny (110) ma istotny wpływ na stabilizowanie pseudomorficzności warstw Fe.

W ramach zadania badane były właściwości strukturalne (mono)-warstw Fe na nominalnie płaskim kryształ W(110) jak i na kryształ wyciętym pod kątem 6.3° w stosunku do powierzchni (110), co odpowiada nominalnej orientacji (540). Rysunek poniżej

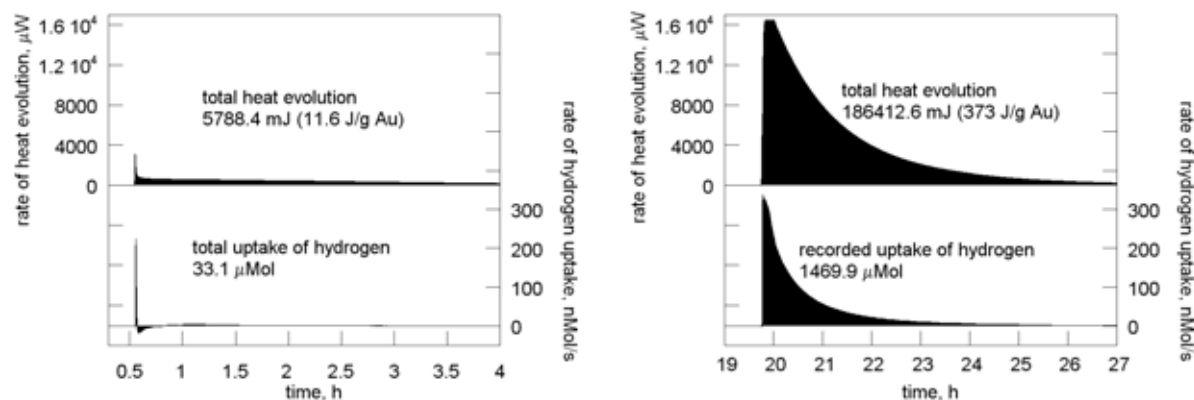


przedstawia wybrane obrazy STM podłoża i warstw Fe (pokrycie podanej jest w warstwach atomowych) w typowych fazach wzrostu przy określonej temperaturze nanoszenia, dla podłoża płaskiego W(110) i wycylnalnego W(540). Stwierdzono, że nominalnie płaskie podłoże wykazuje istotne pofalowanie o amplitudzie dochodzącej do 5 nm na obszarze rzędu $1 \mu\text{m}$, któremu odpowiada struktura tarasów w górę i w dół (rozdzielonych monoatomowymi stopniami w kierunku [110]) o średniej szerokości 20 nm. Pofalowanie jest prawdopodobnie wynikiem naprężeń powstających w kryształach w trakcie jego obróbki termicznej. Regularna struktura stopni o periodyczności 2 nm na powierzchni wycylnalnej (540) najwyraźniej stabilizują tę powierzchnię i amplituda korugacji jest w tym przypadku o rząd wielkości mniejsza (ok. 0.5 nm). Obrazy STM dobrze ilustrują różnice wzrostu Fe na obu powierzchniach. Do najbardziej uderzających należy zaliczyć pojawianie się wyraźnej struktury wzdłuż stopni w monowarstwie Fe na W(540), a także silną anizotropię wzrostu wysp Fe. Ta ostatnia wynika z ograniczeń dyfuzji w kierunku prostopadłym do stopni. Do badania dyfuzji i dynamiki sieci warstw Fe, obok standardowych metod powierzchniowych, takich jak STM czy dyfrakcja niskoenergetycznych elektronów, zastosowano metody synchrotronowe: jądrowe rozpraszanie rezonansowe oraz nieelastyczne rozpraszanie jądrowe. Stwierdzono, że najlepiej dane eksperymentalne opisuje model dyfuzji ad-atomów oraz, że naprężenia w monowarstwie Fe mają silnie anizotropowy charakter, prowadząc do dystorsji w kierunku [1 -1 0].

2.7. Oddziaływanie gazów szlachetnych z powierzchnią metali przejściowych i ich wodorków

(prof. dr hab. Jerzy Haber, dr Erwin Lalik)

Efekt cieplny adsorpcji wodoru na metalicznym złocie jest funkcją obecności gazów obojętnych na powierzchni sorbenta. W obecności azotu adsorpcja wodoru na powierzchni metalicznego złota jest procesem szybkim, ale ma charakter głównie sorpcji fizycznej i przebiega bez dysocjacji cząsteczki H_2 . Towarzyszy jej nieznaczny egzotermiczny efekt cieplny, a ilość sorpcji pozostaje w proporcji do powierzchni właściwej próbki. Sorpcja ma charakter w znacznym stopniu nieodwracalny, to znaczy, desorpcja wodoru z takiej próbki pod normalnym ciśnieniem jest procesem powolnym i wymaga utrzymywania próbki przez wiele godzin w strumieniu czystego azotu. Okazuje się, że poddanie takiej próbki działaniu gazów szlachetnych takich jak hel lub argon powoduje, że kolejnej sorpcji wodoru towarzyszy nadspodziewanie wielki egzotermiczny efekt cieplny, który można mierzyć w mikrokalorymetrze przepływowym, przy równocześnie znacznie zwiększonej ilości sorpcji.



a) b)
Rys. 1. Sorpcja wodoru na proszku złota przed (a) i po (b) kontakcie złota z gazem szlachetnym (He), monitorowana *in situ* za pomocą mikrokalorymetru przepływowego.

Rysunek 1 przedstawia porównanie sorpcji wodoru na świeżej próbce złota (Rys. 1a) oraz na próbce poddanej działaniu helu (Rys. 1b) w temperaturze $110^{\circ}C$ pod ciśnieniem atmosferycznym. Wydzielanie ciepła sorpcji widoczne jest jako wzrost na krzywej kalorymetrycznej, a jednocześnie krzywa detektora cieplno-przewodnościowego (TCD) pokazuje ilość pochłanianego wodoru. Po pewnym czasie wydzielanie ciepła ustaje i obie krzywe wracają do swojej wyjściowej pozycji. Sorpcja wodoru na świeżej próbce metalicznego proszku złota (Rys. 1a) daje niewielki efekt $11.6 J/g Au$, a odpowiadające jej ilość pochłanianego wodoru wynosi $33.1 \mu mol$. Dramatycznie większy efekt cieplny widoczny jest podczas sorpcji na tej samej próbce poddanej działaniu helu (Rys. 1b). Egzotermiczny efekt wynoszący tutaj $373 J/g Au$ towarzyszy pochłaniu $1469.9 \mu mol$ molekularnego wodoru. Podobne efekty "wzmacniania" efektu cieplnego sorpcji wodoru obserwowano także przy użyciu argonu oraz kryptonu, a także, oprócz metalicznego złota, również na nanocząstkach złota osadzonych na nośnikach tlenkowych (TiO_2 , SiO_2). Nadspodziewanie duże efekty egzotermiczne oddziaływania atomowego wodoru z zaadsorbowanymi formami gazów szlachetnych były poprzednio obserwowane w naszej pracowni w tych samych warunkach podczas sorpcji na metalicznym palladzie. Szczegółowy mechanizm obserwowanego zjawiska pozostaje tematem dalszych badań. Opisany efekt jest przedmiotem międzynarodowego zgłoszenia patentowego, jak również przygotowywanej publikacji.

3. Struktury nanoporowate jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

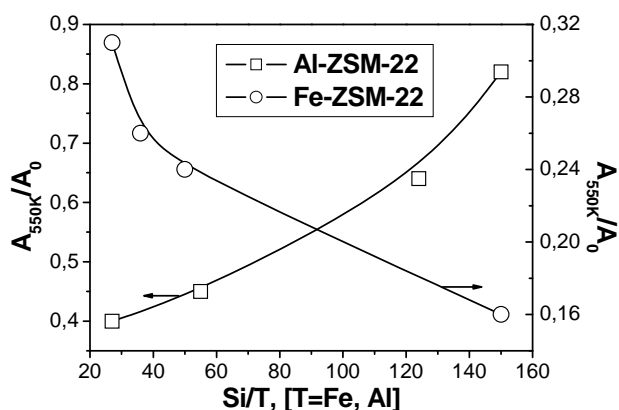
3.1. Podstawione izomorficznie sita molekularne jako podstawa otrzymywania układów mikro- i mezoporowatych

(doc. dr hab. Mirosław Derewiński, dr Joanna Kryściak-Czerwenka)

Podstawienie izomorficzne atomów Si w sieci atomami innych metali jest jedną z metod modelowania właściwości kwasowych zeolitów. Metoda ma szczególne znaczenie w przypadku preparatyki katalizatorów na bazie zeolitów, które powinny posiadać centra aktywne o niższej mocy kwasowej, koniecznej np. dla selektywnej izomeryzacji szkieletowej n-olefin do odpowiednich izo-pochodnych. Żelazo należy do tych spośród pierwiastków, które są najczęściej wykorzystywane w tego typu modyfikacji. Układy otrzymane w wyniku podstawienia izomorficznego przez jony Fe^{3+} wykazują słabsze właściwości kwasowe w porównaniu do kwasowości strukturalnych analogów glinowych. Inną cechą odróżniającą żelazowe pochodne zeolitów od układów glinowkrzemowych, jest niższa stabilność sieciowego Fe w trakcie posyntezy obróbki termicznej/hydrotermicznej.

Celem podjętych badań była synteza serii średnioporowatych zeolitów z grupy TON (ZSM-22) w różnym stopniu podstawionych izomorficznie atomami żelaza ($\text{Si}/\text{Fe} = 27\div 150$), określenie ich stabilności termicznej oraz stwierdzenie czy, i w jakim zakresie powstający materiał pozasieciowy modyfikuje właściwości kwasowe preparatów. Wyniki badań metodą spektroskopii Mössbauera wykazały, że część spośród atomów Fe^{3+} zostaje usunięta z pozycji tetraedrycznych zeolitu zarówno podczas wysokotemperaturowej eliminacji organicznego szablonu (bromek N-etylopirydyniowy), jak również w trakcie aktywacji formy amonowej przed reakcją katalityczną. Ilość żelaza usuwanego z sieci zeolitu zależy od stosunku Si/Fe w wyjściowym preparacie i rośnie ze wzrostem zawartości Fe. Badania kwasowości preparatów serii Fe-TON (w oparciu o sorpcję NH_3 , monitorowaną metodą spektroskopii w podczerwieni) wykazały, że mniej stabilne termicznie zeolity o wysokiej zawartości żelaza charakteryzują się wyższą mocą centrów kwasowych (Rys. 1).

Obserwowane zjawisko tłumaczone jest oddziaływaniem pozasieciowych, kationowych ugrupowań zawierających żelazo (np. FeO^+) z sąsiednimi centrami typu Brønsteda (mostkowe grupy hydroksylowe ugrupowań Si-OH-Fe) co prowadzi do wzrostu mocy kwasowej tych centrów. W przypadku bardziej stabilnych termicznie preparatów o wysokim Si/Fe, gdzie nie występują lub jest silnie zredukowana ilość pozasieciowych ugrupowań, moc kwasowych grup OH nie ulega zmianie.



Rys. 1. Zależność średniej względnej mocy kwasowej centrów Brønsteda od Si/Fe i Si/Al.

3.2. Transformacje węglowodorów aromatycznych na katalizatorach zeolitowych

(doc. dr hab. Bogdan Sulikowski, dr inż. Rafał Rachwałik, dr Ewa Włoch)

Kontynuowano prace dotyczące modyfikacji zeolitów i materiałów mezoporowatych. Jako podstawowy materiał do modyfikacji i preparatyki katalizatorów stosowano ferieryt syntetyczny. Ferieryt posiada, z uwagi na swoją budowę (najmniejszy pierścień w sieci glinokrzemianowej jest pięcioczłonowy), bardzo interesujące właściwości. Jest on zeolitem średnioporowatym przydatnym do syntezy katalizatorów o charakterze kwasowo-zasadowym i redokсовym. Znane katalityczne zastosowania ferierytu obejmują przede wszystkim izomeryzację butenów i usuwanie tlenków azotu. Ferieryt modyfikowano za pomocą dealuminiowania różnymi metodami i charakteryzowano próbki metodami: XRD, BET, SEM, IR i MAS NMR w ciele stałym (^{29}Si , ^{27}Al i ^1H). Ponadto wykonywano badania dotyczące materiałów typu SBA-15 modyfikowanych heteropolikwasem fosforowo-wolframowym.

Opracowano metody dealuminiowania ferierytu z zachowaniem wysokiej krystaliczności próbek. Małe i anizotropowe kontrakcje komórki elementarnej obserwowano tylko dla próbek dealuminiowanych wodnymi roztworami kwasu chlorowodorowego. Zastosowanie spektroskopii w podczerwieni umożliwiło zbadanie oddziaływań pomiędzy wybranymi próbkami a cząsteczkami sondami: amoniakiem oraz CO. Pomiarы te pozwoliły na określenie rodzaju i stężenia centrów aktywnych w preparatach.

Badano transformacje węglowodorów alkiloaromatycznych (izomeryzacja *m*-ksylenu i 1,2,4-trimetylobenzenu) z zastosowaniem reaktora z impulsowym oraz z ciągłym przepływem reagentów. Modyfikacje katalizatorów otrzymanych w oparciu o strukturę ferierytu znajdują odzwierciedlenie w zmianie szybkości izomeryzacji *m*-ksylenu, a ponadto prowadzą do zmniejszenia szybkości dysproporcjonowania *m*-ksylenu i zwiększenia szybkości głównej reakcji izomeryzacji oraz do produktu wzbogaconego w izomer *para*. Ponadto dealuminiowanie ferierytu wykonane w wieloetapowym procesie modyfikacji umożliwiło otrzymanie katalizatorów charakteryzujących się dużo wyższymi stosunkami *p*-ksylenu do *o*-ksylenu (~50) w produktach w porównaniu do katalizatora niemodyfikowanego. Doświadczalnie określono stosunek 1,3,5- do 1,2,3-trimetylobenzenu dla różnych konwersji substratu (1,2,4-trimetylobenzen) w funkcji stopnia dealuminiowania. Tak zdefiniowany indeks kształtoselektywności wynosił ok. 1 dla H-ferierytu i próbki po pierwszym etapie dealuminiowania. Dla tych próbek obserwowano nadmiar izomeru 1,2,3, daleki od składu równowagowego frakcji C₉. W przypadku ostrzejszych warunków dealuminiowania w próbkach tworzył się wtórny system mezoporów, i wtedy w reakcji 1,2,4-trimetylobenzenu indeks kształtoselektywności osiągał wartości zbliżone do równowagi termodynamicznej (2,3 w temp. 700 K). W takich preparatach, z uwagi na obecność mezoporów, centra kwasowe były bardziej dostępne i reakcja przebiegała podobnie jak dla szerokoporowatych glinokrzemianów amorficznych.

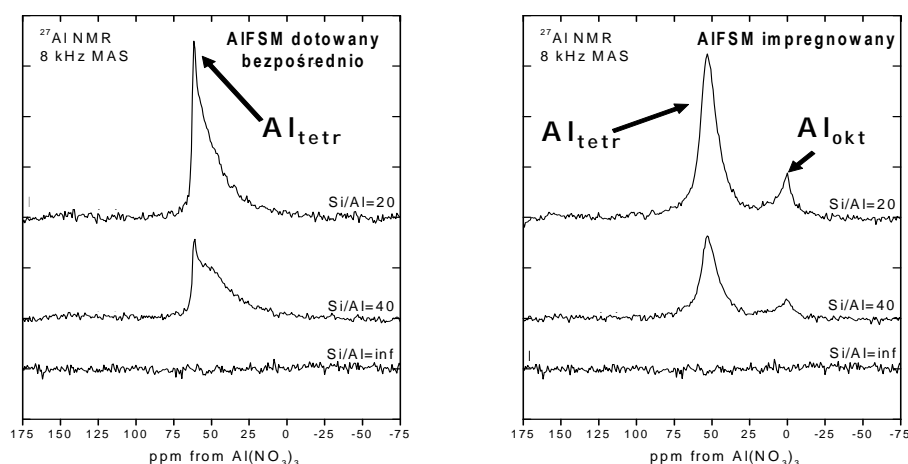
Otrzymano mezoporowate katalizatory typu SBA-15 z wprowadzonym heteropolikwasem fosforowo-wolframowym. Heteropolikwas H₃PW₁₂O₄₀ wprowadzono do sit molekularnych typu SBA-15 zawierających glin lub gal, i charakteryzujących się wysoką powierzchnią właściwą. Katalizatory scharakteryzowano za pomocą szeregu technik. Przeprowadzono testy katalityczne w szeregu reakcjach utleniania, stosując jako utleniacz bezwodny roztwór H₂O₂ w dioksanie, dla rozmaitych klas związków chemicznych, np.: alkany, alkohole, aldehydy i związki aromatyczne. Do badań katalitycznych wyselekcjonowano następujące substraty: 1-metylnaftalen, 2-metoksynaftalen, *m*- i *p*-ksylen, 4-metoksybenzaldehyd, etylobenzen, cykloheksen, cyklopentanol, cykloheksanol, heptanol, oktanol, alkohol benzylowy, 2-metylopentan i *n*-nonan. Produkty reakcji analizowano techniką chromatografii gazowej, a następnie wyznaczano stopień konwersji substratu i selektywność reakcji.

3.3. Krzemiany warstwowe jako podstawa mezoporowatych sit molekularnych

(dr inż. Małgorzata Zimowska, dr inż. Alicja Michalik, dr Jan Połtowicz,
mgr inż. Wojciech Włodarczyk, prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Mezoporowata krzemionka typu FSM (folded sheet mesoporous material) jest otrzymywana z warstwowego krzemianu kanemitu. Najczęstszym sposobem modyfikacji mezoporowatych materiałów krzemionkowych jest wprowadzenie w ich strukturę glinu, co nadaje tym układom właściwości kwasowe i jonowymienne. Celem obecnej pracy było zbadanie wpływu różnych metod aluminacji na właściwości fizykochemiczne układów typu FSM. Glin wprowadzany był na dwa sposoby: bezpośrednio do kanemitu (AIFSM(D)) i posynteżowo (AIFSM(P)), przez impregnację czysto krzemionkowego sita FSM.

Wprowadzenie glinu pogarsza uprządkowanie heksagonalnych kanałów i zmniejsza powierzchnię właściwą preparatów, przy czym efekt jest wyraźniejszy w przypadku aluminacji bezpośredniej. Wyniki badań ^{27}Al MAS NMR świadczą, że w próbkach dotowanych bezpośrednio glin występuje wyłącznie w pozycjach tetraedrycznych, natomiast w preparatach aluminowanych posynteżowo, obok Al tetraedrycznego pojawia się pewna ilość Al w otoczeniu oktaedrycznym, świadcząca o występowaniu glinu w pozycjach pozasieciowych.



W celu określenia w jakim stopniu centra Al eksponowane są we wnętrzu kanałów, a w jakim na zewnętrznej powierzchni rurek, otrzymane preparaty zostały użyte jako nośniki dla kationowej formy metaloporfiryny MnTMPyP i zastosowane w reakcji utlenienia cykloheksenu jodozobenzenem. Nasze poprzednie prace wykazały, że na porfiryne kompensującej centra glinowe wewnątrz kanałów zachodzi preferencyjnie utlenianie allilowe, natomiast porfiryne zakotwiczone na zewnętrznych ścianach rurek krzemionkowych katalizuje reakcję epoksydacji.

Katalizator	Konwersja [%]	Selektywność epoksydacji [%]	Selektywność utleniania allilowego [%]
MnTMPyP/AIFSM40(D)	18	5	95
MnTMPyP/AIFSM40(P)	23	68	32

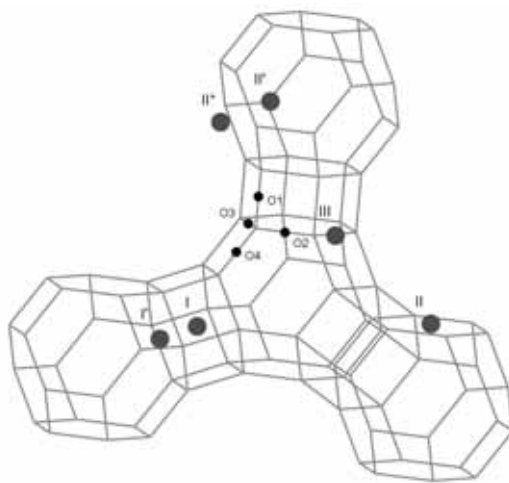
Stwierdzono, że dystrybucja centrów Al zależy od sposobu aluminacji nośnika. Bezpośrednia aluminacja preferuje utlenianie allilowe, co oznacza osadzenie glinu na wewnętrznych ścianach kanałów, natomiast aluminacja posynteżowa sprzyja tworzeniu epoksydu, co świadczy o obecności centrów Al także na zewnętrznej powierzchni nośnika.

3.4. Właściwości strukturalne i elektronowe kationowych centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne

(prof. dr hab. Ewa Broclawik, mgr Paweł Rejmak)

Celem pracy było zbadanie właściwości centrów Cu(I) w fojazycie (FAU) i wyjaśnienie eksperymentalnych widm CO zaadsorbowanego na Cu(I) – FAU. Obliczenia (optymalizacja geometrii, częstości harmoniczne) zostały przeprowadzone metodą Combined Quantum Mechanic – Interatomic Potential Functions (QMPot). W tym podejściu badany system jest dzielony na klastery opisywane metodami chemii kwantowej (DFT w danym wypadku) i otoczenie, opisane mniej kosztownymi obliczeniowo metodami mechaniki molekularnej. Częstości zaadsorbowanego CO zostały dodatkowo policzone półempirycznymi metodami opartymi na liniowej zależności między długością między częstością CO a obliczoną długością wiązania.

W obliczeniach zostały użyte modele sieci o różnej zawartości atomów Al i klaster o różnej wielkości i liczbie atomów Al. Wszystkie 3 główne pozycje Cu(I) w FAU zostały zbadane. Najbardziej stabilne okazały się pozycje I' i II, w których Cu(I) jest skoordynowany przez 3 atomy O i leży w płaszczyźnie pierścienia 6T (T oznacza atomy o koordynacji tetraedrycznej, Si lub Al). Dla centrum II energia wiązania rośnie z liczbą atomów Al w pierścieniu 6T. Kationy w pozycji III są skoordynowane przez 2 atomy O i znacznie słabiej związane. Po adsorpcji CO Cu(I) dąży do osiągnięcia koordynacji trzykrotnej z dwoma atomami O należącymi do jednego tetraedru AlO_4 i atomem węgla. Osiągnięcie takiej koordynacji dla kationu w pozycji II wiąże się ze znaczną zmianą geometrii układu i wyjściem kationu ponad płaszczyznę pierścienia 6T, pozycja Cu(I) w centrum III nie ulega większym zmianom. Ciepła adsorpcji CO maleją ze wzrostem energii wiązania Cu(I). Częstości CO są tym wyższe im mocniej związana jest cząsteczka. Obliczenia wykazały, że w FAU częstości CO są specyficzne dla rodzaju centrum Cu(I), a dla centrum II również zależą od liczby atomów Al w pierścieniu 6T. Proponowane wyjaśnienie widma zaadsorbowanego CO: dla zeolitu Y (niskoglinowy FAU) – pasmo o niskiej częstości pochodzi od centrum II z 2 atomami Al w pierścieniu 6T, o wysokiej od centrum II z 1 atomem Al, dla zeolitu X (wysokoglinowy Al) – pasmo o niskiej częstości pochodzi od centrum II z 3 atomami Al w pierścieniu 6T, pasmo o wysokiej częstości pochodzi od centrum III.



Możliwe pozycje kationów (czarne) i krystalograficzne pozycje atomów O w FAU

4. Kataliza w ochronie ekosystemu

4.1. Opracowanie stabilnego termicznie katalizatora platynowego do utleniania związków organicznych zawierających tlen

(prof. dr Jerzy Haber, dr Tadeusz Machej, mgr Janusz Janas, mgr inż. Robert Janik, dr Halina Sadowska)

Związki organiczne zawierające tlen, takie jak alkohole, etery, ketony itp. są składnikami rozpuszczalników szeroko stosowanych w przemyśle. Zanieczyszczenia te można łatwo przeprowadzić w nieszkodliwe produkty poprzez ich spalanie: termiczne lub katalityczne.

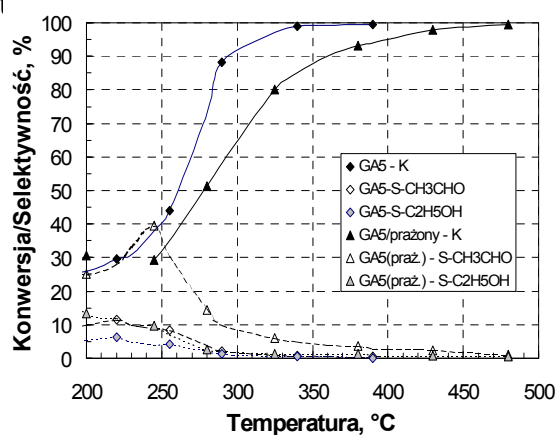
Spalanie termiczne prowadzi się w temperaturach rzędu 800°C; jest ono uzasadnione ekonomicznie tylko w przypadkach wysokiego stężenia zanieczyszczeń w gazach odlotowych, dzięki czemu ciepło spalania wystarcza do podtrzymania wysokiej temperatury w reaktorze. Spalanie katalityczne wymaga znacznie niższych temperatur. Najpopularniejszymi katalizatorami do oczyszczania gazów odlotowych są metale szlachetne (Pt i Pd) osadzone na γ -Al₂O₃. Katalizatory te muszą wykazywać wysoką aktywność katalityczną, wysoką selektywność do produktów pełnego spalania oraz długi czas życia.

Z praktyki przemysłowej wiadomo, że w trakcie długotrwałego użytkowania katalizatory platynowe tracą selektywność do produktów pełnego spalania, pojawiają się natomiast produkty częściowego utlenienia, np. aldehydy.

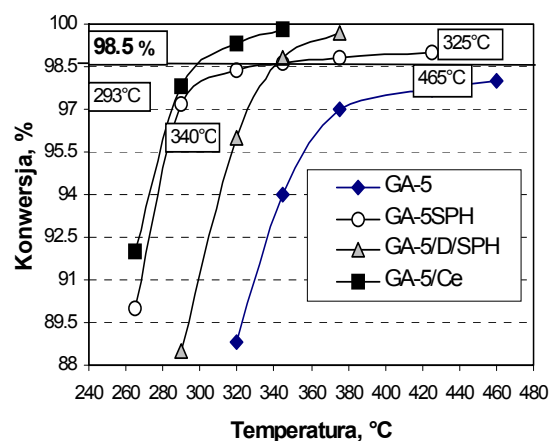
Jako nośniki do preparatyki katalizatorów zastosowano różne odmiany γ -Al₂O₃ (Procatalyse). Oznaczone one są jako: GA5, GA5 SPH, GA5/531P (kulki GA5 pokryte tlenkiem glinu w formie proszku – 531P) i GA5/Ce. Ten ostatni nośnik otrzymano z GA5 impregnując go azotanem ceru, po czym wysuszono i wyprażono w 550°C. Wszystkie nośniki impregnowano roztworem kwasu chloroplatynowego w ilości odpowiadającej 0.05 % wag. Pt. Wartości powierzchni właściwych świeżych katalizatorów wynosiły odpowiednio: 300, 110, 135 i 250 m²/g, a po prażeniu w 550°C (250 godz.): 140, 100, 115 i 145 m²/g.

Jako reakcję testową wybrano pełne utlenianie octanu etylu (OE) i etanolu, których stężenie w powietrzu wynosiło 3 g/m³. Stwierdzono, że długotrwałe prażenie nośników GA5 powoduje znaczny spadek powierzchni właściwej i wzrost selektywności do produktów przejściowych: etanolu i aldehydu octowego (Rys. 1). Zjawiska tego nie obserwowano dla innych katalizatorów.

Rys. 2 przedstawia krzywe „light-off” oraz wartości minimalnych temperatur, w których na różnych prażonych katalizatorach osiąga się 98,5 % konwersji. Można zauważyć, że w porównaniu z katalizatorem standardowym (GA5) modyfikowane katalizatory działają w znacznie niższych temperaturach (zwłaszcza GA5/Ce) i nie ulegają dezaktywacji w trakcie



Rys. 1. Konwersja octanu etylu i selektywność do etanolu i aldehydu octowego na katalizatorach GA



Rys. 2. Krzywe „light-off” i temperatury 98,5 % konwersji dla różnych prażonych katalizatorów

4.2. Opracowanie katalizatora do niskotemperaturowego utleniania zanieczyszczeń organicznych

(prof. dr Jeszy Haber, dr Tadeusz Machej, mgr Janusz Janas, mgr inż. Robert Janik, dr Halina Sadowska)

Lotne związki organiczne (LZO) mogą być niszczone na drodze termicznego lub katalitycznego spalania. Związki takie spalają się w powietrzu tworząc CO_2 i wodę w przypadku LZO zawierających tylko węgiel, wodór i tlen. W idealnym przypadku ciepło wytwarzane podczas utlenienia podtrzymuje proces spalania. Jednak rozcieńczony strumień odpadów wymaga zwykle dodatkowego paliwa.

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

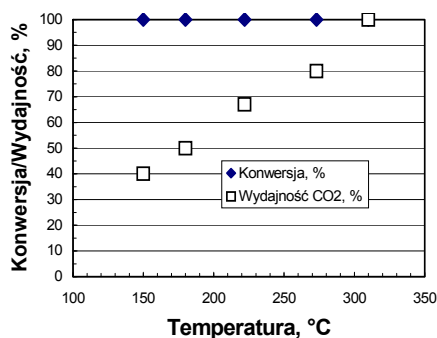
Celem badań było opracowanie katalizatora, który działałby efektywnie w temperaturze poniżej 200°C , t.j. umożliwiał wysoką konwersję LZO i nie powodował adsorpcji substratów i/lub produktów reakcji.

W etapie wstępnym stwierdzono, że standardowy katalizator $\text{Pt}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ nie był aktywny w reakcji pełnego spalania węglowodorów, zarówno alifatycznych jak i aromatycznych, podczas gdy związki zawierające tlen ulegały na nim przemianie do CO_2 , H_2O i aldehydów. Dlatego wybrano metanol i etanol do dalszych badań.

Spreparowano 2 katalizatory: i) platynowy (0,1 % wag.) osadzony na SiO_2 (4 % wag.), a ta warstwa - na $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, ii) mieszane tlenki osadzone na $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Utlenianie metanolu i etanolu prowadzono w reaktorze przepływowym przy $\text{GHSV}=5000\text{ h}^{-1}$. Stężenie reagentów w powietrzu wynosiło 1 g/m^3 . Konwersję alkoholi monitorowano przez ciągły pomiar stężenia CO_2 na wylocie reaktora.

Stwierdzono, że utlenianie metanolu zachodzi efektywnie poniżej 200°C na obu katalizatorach. Pełne utlenienie metanolu i 100 % selektywność do CO_2 obserwowano na katalizatorze $\text{Pt}/\text{SiO}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ powyżej 140°C a na katalizatorze $\text{MO}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ – powyżej 180°C . Poniżej tych temperatur konwersja metanolu jest również całkowita, ale część powstającego CO_2 adsorbuje się nieodwracalnie na powierzchni katalizatora. Zaadsorbowany CO_2 desorbuje gwałtownie przy wzroście temperatury; w produktach reakcji nie stwierdza się natomiast metanolu ani formaldehydu.

Aktywność badanych katalizatorów jest różna w reakcji utleniania etanolu. Pełną konwersję etanolu na katalizatorze $\text{MO}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ obserwuje się w 180°C , podczas gdy uzyskanie tego samego rezultatu na $\text{Pt}/\text{SiO}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ wymaga temperatury 300°C (Rys. 1).



Rys.1. Konwersja etanolu i wydajność CO_2 na katalizatorze $\text{Pt}/\text{SiO}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. $\text{GHSV} = 5000\text{ h}^{-1}$

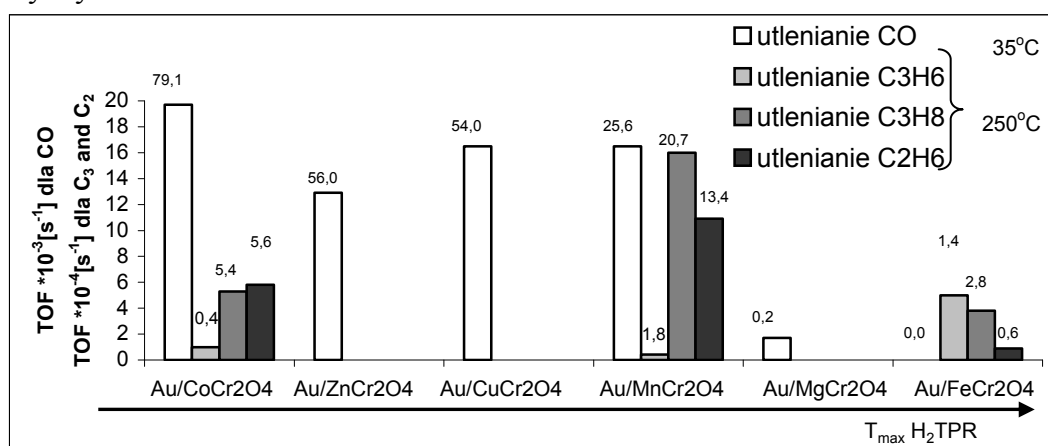
4.3. Utlenianie CO, etanu i propanu na układach nanocząstki złota/tlenki mieszane

(prof. dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr Małgorzata Ruszel, techn. Irena Gressel)

W kontynuacji badań nad właściwościami katalitycznymi układów Au/nośnik tlenkowy testowano w reakcjach utleniania serię układów, w których nanocząstki Au są zdyspergowane na spinelach chromowych z różnymi kationami. Spinele te wykazują różną redukowalność przy tej samej strukturze krystalograficznej, są zatem dobrymi modelami do badań zależności pomiędzy właściwościami katalitycznymi a redoksowymi układów Au/nośnik tlenkowy.

Wcześniejsze badania dotyczące aktywności katalizatorów $Au/M^{II}Cr_2O_4$, gdzie $M^{II} = Co, Mn, Fe$ w 2005 roku zostały poszerzone na układy z nowymi nośnikami ($M^{II} = Zn, Cu, Mg$). Wszystkie katalizatory były testowane w reakcji utleniania CO (także selektywnego – z H_2 w mieszaninie reakcyjnej) oraz dodatkowo w utlenianiu propanu i etanu.

Wyniki aktywności katalitycznej w funkcji redukowalności układów przedstawia poniższy wykres.



Rys. 1. Aktywność katalityczna układów $Au/M^{II}Cr_2O_4$ w reakcjach utleniania CO, C_3H_6 , C_3H_8 i C_2H_6 , liczby nad bločkami oznaczają konwersję w %.

Wyniki badań otrzymane dotychczas dla katalizatorów tego typu (podsumowane w publikacji w Catal. Today - w druku) prowadzą do następujących wniosków:

- układy $Au/M^{II}Cr_2O_4$ są aktywne w reakcji utleniania CO już w niskich temperaturach, najlepszym katalizatorem jest Au/CoCr₂O₄ (100% konwersji CO w 65°C)
- w utlenianiu CO szereg wzrastającej aktywności katalizatorów koreluje w przybliżeniu z szeregiem ich rosnącej redukowalności:

$AuFeCr (0.0/450) < AuMgCr (4.8/350) < AuMnCr (25.6/210) < AuZnCr (56.0/140) < AuCuCr (54.0/160) < AuCoCr (79.1/100)$

(w nawiasach podano konwersję CO w 35°C [%]/ temperaturę maksimum redukcji [°C])

- układy $Au/M^{II}Cr_2O_4$ są aktywne i selektywne w utlenianiu CO w mieszaninie z H_2 (tzw. selektywnym utlenianiu CO), dla Au/CoCr₂O₄ 100% konwersji CO przy 94% selektywności do CO₂ osiągnięto w temperaturze 60°C; zachowany jest szereg aktywności:

$AuFeCr (1.5/100) < AuMgCr (2.5/99) < AuMnCr (54.0/97) < AuZnCr (55.0/98) < AuCuCr (73.0/98.5) < AuCoCr (85/98)$

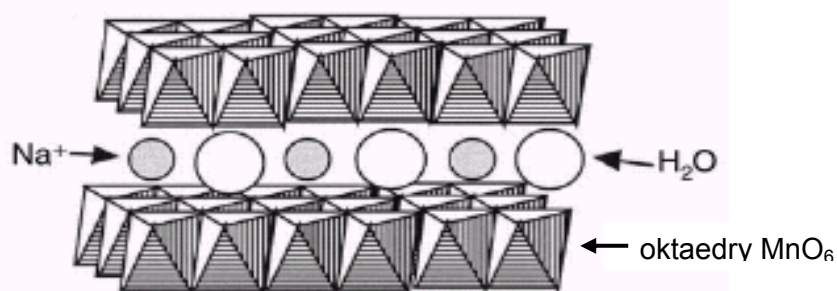
(w nawiasach podano konwersję CO/ selektywność do CO₂ w 60°C w [%])

- układy $Au/M^{II}Cr_2O_4$ są aktywne w reakcji utleniania węglowodorów: propanu, propenu i etanu w wyższych temperaturach (>200°C), reakcje przebiegają głównie z utworzeniem produktów całkowitego spalania - CO_x; w utlenianiu etanu katalizatory są mniej aktywne (konwersja) niż w utlenianiu węglowodorów C₃. Nie zaobserwowano korelacji pomiędzy redukowalnością układów a ich właściwościami katalitycznymi w tych reakcjach.

4.4. Warstwowe związki manganu jako osnowa układów katalitycznych do całkowitego spalania związków organicznych

(Andrzej Mrzygłód, dr inż. Roman Dula, mgr inż. Robert Janik, dr Tadeusz Machej, prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Wśród tlenków manganu o budowie warstwowej szczególne miejsce zajmuje birnezyt. Ten naturalnie występujący związek można względnie łatwo otrzymać w laboratorium, a jego właściwości jonowymienne i podatność na przekształcenia strukturalne są przedmiotem dużego zainteresowania, m.in. ze względu na możliwość zastosowania w ogniwach litowych, a także jako prekursorów oktaedrycznych sit molekularnych (OMS). Układy na osnowie birnezytu charakteryzują się także ciekawymi właściwościami katalitycznymi w reakcjach utleniania.



Struktura birnezytu

Birnezyt jest najczęściej otrzymywany w środowisku silnie zasadowym, przez utlenianie związków Mn²⁺ lub redukcję związków MnO₄⁻. W obecnej pracy podjęto próbę syntezy birnezytu na wysokopowierzchniowym, zasadowym nośniku MgO-Al₂O₃ (220 m²/g) otrzymanym przez rozkład termiczny hydrotalkitu magnezowo-glinowego. Metoda syntezy obejmowała impregnację nośnika roztworem Mn(NO₃)₂ lub roztworem KMnO₄, w ilości odpowiadającej 1 monowarstwie, suszenie oraz kalcynację w temperaturze 450°C. Struktura birnezytu widoczna w próbkach suszonych, po kalcynacji ujawniała się jedynie w preparacie otrzymanym przez impregnację nadmanganianem. Z danych literaturowych wiadomo, że birnezyt, w zależności od natury kationów międzywarstwowych, rozkłada się w zakresie temperatur 200-400°C. Obecność refleksów charakterystycznych dla birnezytu w preparacie wygrzewanym w 450°C wskazuje zatem na stabilizację tej struktury na nośniku magnezowo-glinowym, w przypadku, gdy powstaje ona z prekursora KMnO₄. W przypadku prekursora Mn(NO₃)₂ po kalcynacji widoczna była faza słabo krystalicznego spinelu magnezowo-manganowo-glinowego MgMn_{1.75}Al_{0.25}O₄.

Kalcynowane próbki zostały przetestowane w reakcji całkowitego spalania toluenu (reaktor przepływowy, objętość katalizatora 0.5 cm³, stężenie toluenu 2 g/m³, GHSV 10000 h⁻¹ i 30000 h⁻¹, zakres temperatury 150-450°C). Katalizator uzyskany z prekursora Mn(NO₃)₂ okazał się znacznie bardziej aktywny niż ten otrzymany z KMnO₄. W pierwszym przypadku, przy obciążeniu 10000 h⁻¹, 50% konwersji osiągnęto dla temperatury równej 190°C, w drugim wynosiła ona 310°C. Przy obciążeniu 30000 h⁻¹ temperatury T₅₀ wynosiły odpowiednio 235°C i 340°C. Wynik ten sugeruje, że korzystne właściwości katalityczne można wiązać z powstaniem słabo krystalicznej, powierzchniowej fazy spinelu magnezowo-manganowo-glinowego.

5. Mechanizmy procesów biokatalitycznych

5.1. Mechanizm działania elektrod lakazowych

(dr Janina Rodakiewicz-Nowak, dr Paweł Nowak, Marta Bieroń (UJ-magistrant), dr Alina Madej (UJ))

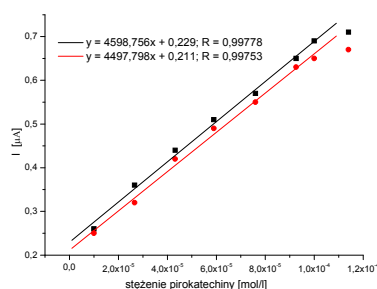
Podstawowy element coraz bardziej popularnych biosensorów elektrochemicznych stanowią elektrody, w których lub na których powierzchni immobilizowany jest receptor biologiczny, najczęściej enzymatyczny. Zastosowanie elektrod z immobilizowaną lakazą umożliwia oznaczanie wielu związków fenolowych, zarówno tych szkodliwych dla środowiska naturalnego, jak i tych ważnych ze względów medycznych, jak neurotransmitery.

W pracy skonstruowano i zbadano elektrody grafitowe pokryte warstwą żelu ditlenku tytanu, zawierającą tyrozynazę, lakazę oraz tyrozynazę i lakazę jednocześnie. W pracy wykorzystano preparat białkowy o znacznej zawartości lakazy *Cerrena unicolor*, pochodzący z hodowli grzyba w Zakładzie Biochemii UMCS (dr A. Jarosz-Wilkołazka).

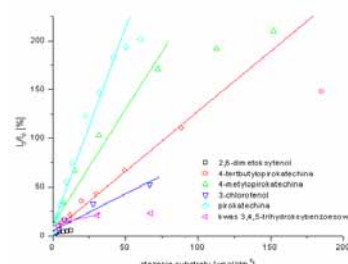
Zbadano wpływ grubości nakładanego żelu na trwałość powłoki żelowej i trwałość elektrod. Opracowano sposób suszenia i przechowywania elektrod. Zbadano możliwość wykorzystania przygotowanych elektrod mono- i bienzymowych do oznaczania: pirokatechiny, 4-tert-butylopirokatechiny, 4-metylopirokatechiny i 2,6-dimetoksyfenolu (typowych substratów tyrozynazy lub lakazy).



Typowe elektrody



Elektrody węglowe z immobilizowaną lakazą w żelu TiO₂ i tyrozynazą w żelu TiO₂



związek fenolowy	elektrody monoenzymowe				elektroda bienzymowa	
	z tyrozynazą		z lakazą		czułość [%·dm ³ /µmol]	zakres prostoliniowości [mol/dm ³]
	czułość [%·dm ³ /µmol]	zakres prostoliniowości [mol/dm ³]	czułość [%·dm ³ /µmol]	zakres prostoliniowości [mol/dm ³]		
pirokatechyna	7.943±0.111	2.0·10 ⁻⁷ –1.1·10 ⁻⁵	-	1.0·10 ⁻⁵ –5.0·10 ⁻⁵	5.382±0.102	2.0·10 ⁻⁷ –2.3·10 ⁻⁵
4-tert-butylopirokatechyna	1.701±0.039	1.9·10 ⁻⁶ –6.5·10 ⁻⁵	-	-	1.235±0.040	2.0·10 ⁻⁶ –8.9·10 ⁻⁵
4-metylopirokatechyna	4.732±0.123	7.3·10 ⁻⁷ –4.4·10 ⁻⁵	-	2.4·10 ⁻⁶ –1.6·10 ⁻⁵	3.275±0.249	8.4·10 ⁻⁷ –3.2·10 ⁻⁵
2,6-dimetoksyfenol	-	-	-	1.9·10 ⁻⁶ –1.4·10 ⁻⁵	0.886±0.403	7.0·10 ⁻⁷ –4.2·10 ⁻⁶

Ponadto wykonano zadania:

Aktywność katalityczna enzymów ligninolitycznych w układach o kontrolowanej zawartości wody

(prof. dr hab. Jerzy Haber, dr Janina Rodakiewicz-Nowak)

Grzyby białej zgnilizny drewna są najważniejszą grupą organizmów zdolnych do rozkładu ligniny. Odpowiedzialne za tę aktywność są głównie zewnątrzkomórkowe enzymy ligninolityczne: hemowe ligninazy i peroksydazy manganozależne oraz miedziowe oksydazy

polifenolowe (lakazy). Enzymy ligninolityczne można stosować również do utleniania różnorodnych związków aromatycznych, włącznie z toksycznymi wielopierścieniowymi węglowodorami aromatycznymi, fenolami, chlorofenolami i barwnikami. Wiele z tych związków trudno rozpuszcza się w wodzie i konwersja ich wymaga stosowania roztworów w rozpuszczalnikach organicznych.

Celem prac było określenie wpływu parametrów fizykochemicznych środowiska (pH, stężenie oraz aktywność chemiczna wody, stężenie i aktywność chemiczna rozpuszczalnika, właściwości molekularne rozpuszczalnika i substratu reakcji enzymatycznej) na trwałość oraz aktywność katalityczną oksydaz polifenolowych (lakazy i tyrozynazy) oraz peroksydaz w roztworach rozpuszczalników mieszających się z wodą oraz mikroemulsjach wody w oleju. W mikroemulsjach wody w oleju badano również wpływ parametrów fizykochemicznych mikroemulsji (dynamika układu, pH, zawartość wody) oraz rodzaju substratu na aktywność katalityczną lakaz, tyrozynaz, katalazy i lipoksygenazy.

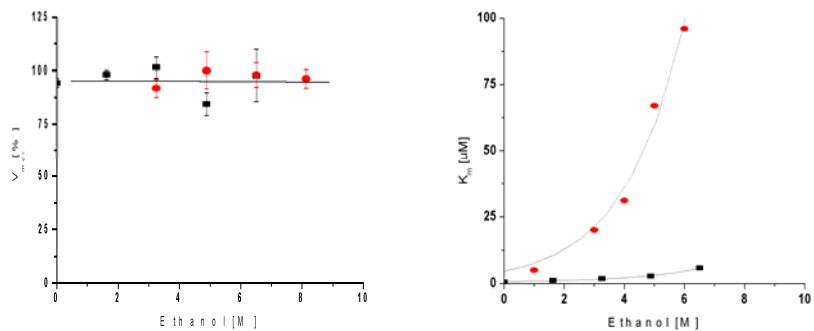
Przeanalizowano różne możliwe modele analityczne aktywności katalitycznej enzymów i możliwości przewidywania aktywności katalitycznej w badanych układach. Zdecydowana większość prac odnosiła się do niebieskiej lakazy z różnych źródeł (*P. radiata*, z hodowli własnej) oraz *P. tigrinus*, *P. ostreatus*, *C. unicolor* i *C. versicolor* (w ramach współpracy), a także żółtej lakazy *P. tigrinus* i *P. ostreatus* (w ramach współpracy). Stwierdzono, że lakazy niebieskie cechują się stosunkowo znaczną odpornością na inaktywację w roztworach rozpuszczalników organicznych i w znacznym zakresie można przewidywać aktywność katalityczną tych enzymów wobec różnych substratów w obecności rozpuszczalników organicznych mieszających się z wodą i w mikroemulsjach wody w oleju, po przeprowadzeniu badań wstępnych. Natomiast, lakazy żółte są bardziej wrażliwe na obecność rozpuszczalników organicznych, ich wrażliwość w znacznej mierze zależy od historii preparatu. Ponadto enzymy te bez obecności mediatorów utleniają wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne. Lepszym środowiskiem do wykorzystywania lakaz żółtych w konwersji substratów hydrofobowych są mikroemulsje wody w oleju, w których enzymy są bardziej aktywne, a obecność rozpuszczalnika niepolarnego zwiększa rozpuszczalność omawianych substratów.

Praca w znacznym stopniu opierała się na współpracy krajowej i międzynarodowej, z: Zakładem Biochemii UMCS (Lublin), Zakładem Fizjologii i Biochemii Roślin i Mikroorganizmów RAN (Saratow), Zakładem Fizjologii i Biochemii Mikroorganizmów RAN (Pushchino), ETH (Zurych) oraz Rengo and Shimadzu Co., (Osaka).

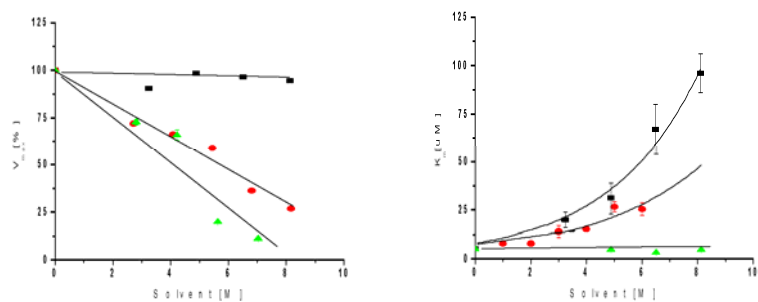
Badania charakterystyki katalizy enzymatycznej preparatów enzymów z Zakładu Biochemii UMCS

(dr Janina Rodakiewicz-Nowak)

Badano aktywność katalityczną lakazy *Cerrena unicolor* w reakcji utleniania syryngaldazyny (SGZ) w szerokim zakresie stężeń różnych rozpuszczalników organicznych w wodnym roztworze buforowym. Ponadto wyznaczono aktywność katalityczną badanej lakazy w reakcji utleniania dwu innych substratów: pirokatechiny (CAT) i 2,6-dimetoksyfenolu (DMOP) w roztworach wodnych etanolu i DMSO. Rozpuszczalniki organiczne wywierały podobny wpływ na maksymalną szybkość reakcji enzymatycznej (V_{max}) utleniania tych substratów. W badanym zakresie stężeń etanol nie zmieniał wartości V_{max} , podczas gdy DMSO redukował te wartości w zbliżony sposób ($0.71 M^{-1}$). Wpływ rodzaju rozpuszczalnika na wartości V_{max} dla SGZ wzrastał w szeregu etanol < aceton < DMSO. Wzrost wartości stałej Michaelisa K_m był zależny zarówno od rozpuszczalnika (DMSO < aceton < etanol) jak i od substratu.



Rys 1. Wpływ dodatku etanolu na wartości V_{\max} i K_m w procesie enzymatycznego utleniania SGZ (●) i CAT (■).

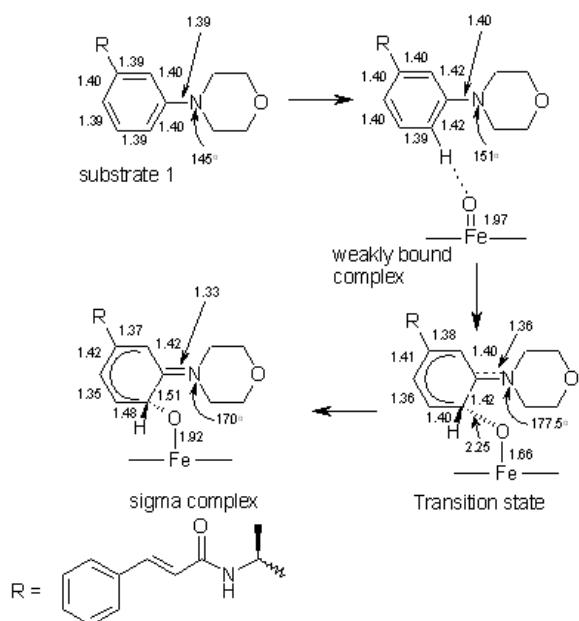


Rys. 2. Wpływ rodzaju rozpuszczalnika organicznego na wartości K_m oraz V_{\max} w reakcji enzymatycznego utleniania SGZ : etanol (■), aceton (●), DMSO (▲).

5.2. Strukturalne uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne

(prof. dr hab. Ewa Brocławik, Mariusz Radoń (Uniwersytet Jagielloński),
Shaikh Abdul Rajjak (Tohoku University, Japonia))

Cytochromy P450 biorą udział w procesach biokatalitycznych związanych z metabolizmem leków i innych toksycznych substancji a więc są ważnym elementem systemu obronnego organizmu. Jednym z nich jest cytochrom CYP450 3A4, zawierający żelazo skoordynowane z pierścieniem hemowym oraz piątym ligandem białkowym – cysteiną w pozycji proxymalnej. Badaną reakcją był pierwszy etap funkcjonalizacji (*S*)-*N*-[1-(3-morfolino-4-yl-fenyl)etylo]-3-fenylakryl amidu (1), potencjalnego leku antymigrenowego, gdzie zachodzi hydroksylacja pierścienia fenyłowego (mechanizm hydroksylacji aromatycznej). Wykonano obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT dla klasterowego modelu centrum aktywnego zbudowanego z grupy oxyferylowej w pierścieniu hemowym z liganiem SCH₃ w pozycji proxymalnej (Fe⁴⁺O²⁻(C₃₄O₄N₄H₃₂)¹⁻(SCH₃)¹⁻). W pozycji dystalnej umieszczono cząsteczkę substratu (1). Profil energetyczny dla procesu tworzenia kompleksu σ pomiędzy tlenem oxyferylowym a węglem pierścienia fenyłowego wyznaczono poprzez skanowanie energii potencjalnej wzdłuż współrzędnej reakcji (odległość C---O). Etap ten limituje szybkość badanej reakcji enzymatycznej.



Schemat obok pokazuje charakterystyczne zmiany geometrii układu reagentów wzdłuż ścieżki reakcji dla utworzenia kompleksu σ . Substrat tworzy prekompleks, słabo związany przez wiązanie wodorowe C-H---O (-21 kcal/mol). Stan przejściowy leży 7.4 kcal/mol powyżej słabego kompleksu wyjściowego, po przekroczeniu bariery tworzy się silnie związany kompleks σ o energii -8.5 kcal/mol w stosunku do prekompleksu. Bariera energetyczna dla substratu (1) jest znacząco niższa od bariery dla benzenu i jego pochodnych (12-18 kcal/mol). Źródłem tej bariery jest rehybrydyzacja węgla α i częściowa utrata aromatyczności pierścienia. W przypadku substratu (1) strata energii jest częściowo rekompensowana przez

rehybrydyzację azotu w pierścieniu morfolinowym z utworzeniem wiązania podwójnego z pierścieniem fenyłowym. W produkcie występują trzy wiązania podwójne oraz jedno silne wiązanie σ , co powoduje jego stabilizację energetyczną. Przedstawione wyniki wskazują, że podstawniki w pozycji orto do węgla tworzącego wiązanie σ z centrum aktywnym, zawierające piramidalny azot, powinny przyspieszać reakcję hydroksylacji tego substratu przez CYP 3A4, a więc przyspieszać jego metabolizm.

5.3. Metabolity ksenobiotyczne metanotrofów jako element ich metabolonu – analiza dostępnych informacji

(dr Władysław Kraus)

Wyniki prac nad ustaleniem pełnych *genomów* organizmów (genomika) dały w końcu ubiegłego wieku impuls do powstania szeregu nowych „-omik”; przedmiotem ich badań stały się pełny skład i rozmieszczenie substancji tworzących organizmy, m.in. białek (*proteomika*) i metabolitów (*metabolomika*) oraz ich wzajemnych oddziaływań. Sprzyja temu rozwój zaawansowanych technik do ich wydzielenia i identyfikacji, jak nanoskalowa ultra-wysoko-ciśnieniowa kapilarna chromatografia cieczowa zespolona z jonową cyklotronową rezonansową spektrometrią masową z transformacją Fouriera użyta z powodzeniem do analiz niektórych mikroorganizmów czy sposobów badawczych, jak *dynamiomika* badająca „naturalne” rodzaje biologicznie istotnych i nieredukowalnych sposobów zwijania (*folding*) białek. Dąży się przy tym raczej do oparcia metod na różnicach właściwości fizycznych związków niż ich cech chemicznych by unikać podczas analiz zmian *proteomu* (jednocześnie w kompartmentach organizmu może podlegać ekspresji nawet do 10 000 różnych białek) i *metabolomu* (metabolity o masie cząsteczkowej do 500 a.j.m.). Systemowa analiza profili i tempa przemian metabolitów służy rozumieniu funkcjonowania organizmu w środowisku oraz do ustalenia funkcji genów jego genomu. Układy metaboliczne bakterii (w tym metanotrofów) pozwalają im mobilizować składniki odżywcze jak i immobilizować lub powodować detoksyfikację substancji dla nich szkodliwych, co czynią także przy pomocy wydzielanych do otoczenia białek i metabolitów (proteom i metabolom zewnętrzny). Metabolity są jednak na tyle liczne i różnorodne, że zwykle możliwa jest analiza wybranych podzbiorów metabolonu. Niniejszej pracy dotyczyła analiza informacji na taki temat rozproszonych w literaturze dotyczącej metanotrofów.

Metanotrofy to grupa występujących powszechnie w górnej części gleby oraz wód (gdzie stężenie tlenu jest dostatecznie duże) bakterii, dla których jedynym źródłem węgla i energii są związki „jednowęglowe” (bez wiązań C-C w cząsteczkach, głównie metan). Enzymy ich głównego szlaku metabolicznego przetwarzają metan. Dają mu początek dwie formy monoooksygenazy metanowej (MMO) z niehemowym żelazem lub miedzią (ulegające ekspresji zależnie od dostępności metanu i tlenu w otoczeniu), mogące według dostępnych informacji utleniać obce metanotrofom związki chemiczne (ksenobiotyki). Istnieją informacje o kilkudziesięciu (bliżej stu) takich związkach; są to m.in. uciążliwe dla środowiska związki grupy BTX, metylowe pochodne pirydyny oraz alkeny o znaczeniu przemysłowym. U innych bakterii ekspresję takich enzymów indukować mogą obecne w środowisku ksenobiotyki (metodami inżynierii genetycznej można dodać do ich genomu stosowne geny). Analiza danych literaturowych i wyniki badań własnych wskazują, że metanotrofy wydzielają do otoczenia (i mogą zeń pobierać) produkty przemian związków ksenobiotycznych, a nadto otoczenie to może stanowić „magazyn” produktów pośrednich takich przemian (produkty te podlegają działaniu także innych niż MMO enzymów metanotrofów). Użycie do badań tzw. macierzy DNA pokazało, że czynniki środowiska (rodzaj i technologia upraw czy nawożenie) wpływają na skład gatunkowy metanotrofów (chemicznymi nośnikami informacji mogą być pochodne kwasu benzoowego), co decyduje o ilości wiązanego przez nie metanu. Wiadomo o wpływie na enzymy szlaku MMO i całe komórki różnych jonów oraz innych związków na przebieg (do uniemożliwienia włącznie) przemian ksenobiotyków i różnicach związanych z różnymi szczepami gatunku metanotrofów. Ekspresja różnych form MMO jest zależna od stężenia jonów miedziowych w otoczenie bakterii. Dane te wskazują, że ksenobiotyki uczestniczą w kształtowaniu metabolonu metanotrofów i mogą stanowić jego podzbiór.

6. Dynamika układów dyspersyjnych i biokoloidalnych

6.1. Wyznaczenie wpływu siły jonowej na kinetykę osadzania cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych

(prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk, dr Lilianna Szyk-Warszyńska, dr Paweł Weroński, dr Barbara Siwek, mgr Katarzyna Jaszczółt)

Oddziaływania makromolekuł, cząstek koloidalnych i biokoloidalnych z powierzchniami granicznymi prowadzące do zjawisk adsorpcji, osadzania i adhezji mają istotne znaczenie w wielu procesach naturalnych, jak również w procesach związanych z ochroną środowiska naturalnego, np. w filtracji. Ważne jest również zrozumienie mechanizmów zjawisk adsorpcji zachodzących w układach biologicznych, co umożliwia optymalizację nowych technologii związanych z selektywną separacją cząsteczek DNA, protein, wirusów, komórek patologicznych, bakterii itp. Efektywność tych procesów jest często zwiększana przez użycie substancji wiążących, zaadsorbowanych na powierzchni, np. jonów metali ciężkich, polielektrolitów, czy monoklonalnych protein, spełniających rolę centrów aktywnych. Głównym celem przeprowadzonych badań było więc wyznaczenie wpływu siły jonowej na kinetykę adsorpcji na powierzchniach heterogenicznych, strukturę tworzonych warstewek oraz pokrycia maksymalne. Powierzchnie heterogeniczne wytwarzano przez wstępną adsorpcję monodispersyjnych nanocząstek koloidalnych. Maksymalne pokrycia wyznaczone były przez ekstrapolację danych kinetycznych, przedstawiających zależność pokrycia od czasu. Pomiar kinetyki osadzania cząstek były prowadzone przy użyciu bezpośrednich metod obserwacji mikroskopowych *in situ*, stosując obiektyw długoogniskowy, sprzężony z kamerą CCD. Stężenie powierzchniowe cząstek wyznaczone było mikroskopowo przez ich zliczanie na statystycznie wybranych obszarach. Dla wygody było wyrażane w stopniu pokrycia, zdefiniowanym następująco: $\Theta_p = \pi a^2 \langle N_p \rangle$ (gdzie $\langle N_p \rangle$ jest stężeniem powierzchniowym cząstek, a promieniem danej cząstki). Kinetyka adsorpcji cząstek była wyznaczana przez pomiar wartości $\langle N_p \rangle$ w funkcji czasu adsorpcji t . Pomiar doświadczenia wykazały, że wzrost siły jonowej wywiera znaczący wpływ na kinetykę adsorpcji jedynie dla większych pokryć, zbliżających się do pokrycia maksymalnego. Obserwacje te były w pełnej zgodności z wynikami teoretycznymi wyznaczonymi na podstawie numerycznego całkowania równania kinetycznego z nieliniowymi warunkami brzegowymi. Wykazano natomiast, że siła jonowa wywiera bardzo znaczący wpływ na strukturę tworzonych warstewek cząstek oraz pokrycia maksymalne. Szczególnie istotną okazała się obserwacja, że zmniejszenie siły jonowej powoduje zmniejszenie stopnia koordynacji centrum adsorpcji do jedności, tak więc jedna cząstka adsorbuje się na jednym centrum. W ten sposób możliwe staje się modelowanie zjawisk adsorpcji na powierzchniach o randomalnym rozkładzie centrów adsorpcji, co nie było możliwe przy użyciu dotychczasowych metodyk pomiarowych. Wykazano też, że spadek siły jonowej, powodujący wzrost zasięgu odpychających sił elektrostatycznych, powoduje istotne zmniejszenie pokryć maksymalnych cząstek. Wyniki te interpretowano ilościowo w oparciu o symulacje numeryczne prowadzone metodą Monte-Carlo, w których uwzględniono możliwość trójwymiarowej adsorpcji oraz oddziaływania lateralne pomiędzy cząstkami. Uzyskane wyniki wskazują jednoznacznie, że przez zmianę siły jonowej możliwe jest sterowanie procesami transportu i osadzania cząstek koloidalnych, a przez to stabilnością układów koloidalnych.

6.2. Wpływ szorstkości powierzchni hydrofobowej na kinetykę powstawanie kontaktu trójfazowego gaz-ciecz-ciało stałe

(prof. dr hab. Kazimierz Małysa, dr Marcel Krzan, mgr Marta Krasowska, mgr Jan Zawala, inż. Marta Barańska)

Zderzenia baniek z ziarnami oraz powstanie kontaktu trójfazowego (TPC) jest warunkiem koniecznym dla utworzenia agregatów bańka-ziarno i flotacyjnego rozdzielania różnych składników rudy. Przyjmuje się powszechnie, że hydrofobowość powierzchni ziaren jest warunkiem koniecznym i wystarczającym dla przyczepienia ziarna do bańki, ponieważ film zwilżający jest niestabilny na hydrofobowej powierzchni i w wyniku jego przerwania powstaje w trakcie zderzeń kontakt trójfazowy (TPC) gaz-ciecz-ciało stałe.

Badano procesy zachodzące podczas kolizji bańki z modelowym hydrofobowym ciałem stałym (Teflon) o różnej szorstkości powierzchni. Doświadczenia wykonywane były w taki sposób, że prawdopodobieństwo kolizji było zawsze 100%. A zatem w tym modelowym układzie było możliwe określenie wpływu szorstkości powierzchniowej na czas powstawania kontaktu trójfazowego oraz oszacowanie grubości pęknięcia filmu zwilżającego. Przy użyciu szybkiej kamery (1182 Hz) rejestrowano zmiany prędkości, odbicia oraz czas przyczepienia bańki zderzającej się z płytką teflonową umiejscowioną w odległości ok. 300 mm powyżej punktu tworzenia bańki (otwór kapilary). Pomiarów wykonano dla 5 płytek teflonowych o różnej szorstkości powierzchni, która była modyfikowana przy użyciu różnych papierów ściernych. Stwierdzono, że szorstkość powierzchni jest czynnikiem o fundamentalnym znaczeniu dla czasu powstawania TPC przez bańkę zderzającą się z płytkami Teflonu. Należałoby oczekiwać, że ponieważ Teflon ma modelowo hydrofobową powierzchnię (kąąt zwilżania ok. 115° w wodzie destylowanej) dlatego każda kolizja powinna prowadzić do powstania TPC i przyczepienia bańki. Jednakże stwierdzono, że w przypadku najbardziej gładkich powierzchni Teflonu (tzw. "Teflon I" oraz "Teflon II" o szorstkości powierzchni poniżej $1 \mu\text{m}$) nie następowało natychmiastowe przyczepienie bańki w trakcie pierwszej kolizji. Czas kontaktu bańki zderzającej się z różnymi płytkami teflonowymi był bardzo krótki; 2-3 ms. Równocześnie kształt odbijającej się bańki zmieniał się gwałtownie w czasach krótszych od 0.85 ms. Wyniki te pokazują, że w trakcie tak krótkiego czasu kolizji warstwa cieczy oddzielająca zderzającą się bańkę od powierzchni ciała stałego nie zdążyła osiągnąć grubości krytycznej rozrywu. W wodzie destylowanej cztery a nawet więcej cykli "zderzenie-odbicie" były zarejestrowane przed przyczepieniem bańki. Ze wzrostem szorstkości powierzchni czas przyczepienia, tj. czas od momentu pierwszego zderzenia do powstania TPC ulegał skróceniu i w przypadku powierzchni Teflonu o szorstkości powyżej ok. $30 \mu\text{m}$ bańka ulegała przyczepieniu zawsze podczas pierwszego zderzenia. W oparciu o wyznaczony czas kontaktu bańki z powierzchnią Teflonu i przy zastosowaniu równania Scheludko dla wyciekania kolistego płasko-równoległego filmu pomiędzy powierzchniami stałą i swobodną obliczono, że średnia grubość filmu ciekłego rozdzielającego bańkę i teflon (w momencie jego przerwania) wynosiłaby ok. $2 \mu\text{m}$. Fakt, że szorstkość powierzchni ma tak istotny wpływ na czas przyczepienia i utworzenie TPC jest najprawdopodobniej spowodowany przez następujące czynniki: i) większe nierówności na bardziej szorstka powierzchnia oznaczają większe prawdopodobieństwo osiągnięcia lokalnie krytycznej grubości rozrywu filmu zwilżającego, oraz ii) większa szorstkość oznacza iż większe ilości powietrza mogą być obecne na takiej powierzchni i może to ułatwiać rozerwanie filmu. Istotność obecności powietrza i mechanizm jego wpływu na powstawanie kontaktu trójfazowego i przyczepienie bańki są przedmiotem prowadzonych obecnie badań.

6.3. Oddziaływania związków biologicznie czynnych z modelowymi membranami fosfolipidowymi

(dr Wanda Barzyk)

Przebadano proces penetracji trzech peptydów do monowarstw nierozpuszczalnych utworzonych przez fosfolipidy typowe dla błon komórkowych, tj., 1,2-dipalmitoyl-sn-glicero-3-fosfocholine (DPPC) lub L- α -phosphatidyl-D,L-glicerol-dipalmitoyl (DPPG). Praca ta stanowi część badań prowadzonych przy współpracy z Uniwersytetem Henri Poincaré w Nancy (Francja) nad penetracją substancji biologicznie czynnych do monowarstw fosfolipidowych jako modelowych membran biologicznych. Chociaż te ostatnie są dwuwarstwami (bilayers) zawierającymi rozpuszczone sterole i proteiny, ich zewnętrzna granica fazowa - w obszarach wolnych od rozproszonych składników - jest identyczna pod względem struktury molekularnej z granicą monowarstwy fosfolipidowej, po stronie roztworu. Zakres gęstości typowy dla membran biologicznych odpowiada fazie ciekłej lub ciekło-krystalicznej, lub też mieszaninie tych faz - wykrywanych w monowarstwach fosfolipidowych techniką wagi Langmuira, w zakresie ciśnienia powierzchniowego $\Pi = 35 \pm 10$ mN/m.

Jako penetranty, przebadano peptydy wyodrębnione z protein mleka krowiego: 5-członowy peptyd wyodrębniony z α -lakto-albuminy, 16-członowy peptyd z α -s2 kazeiny oraz 23-członowy peptyd wyodrębniony ze składnika PP3, o masach atomowych odpowiednio: 689, 2211 i 2683 g/mol. Testy na aktywność antybakteryjną tych substancji, przeprowadzone wcześniej we Francji, dały wynik pozytywny. Ponieważ peptydy te były dostępne w małych ilościach, opracowano procedurę badań penetracji umożliwiającą zminimalizowanie próbki roztworu do 20 ml; Na powierzchnię wody w szalce Petriego nanoszono - przy użyciu strzykawki Hamiltona - monowarstwę fosfolipidową, aż do uzyskania określonej wartości równowagowego ciśnienia powierzchniowego, Π_t , w zakresie 5-50 mN/m. Niewielką objętość roztworu peptydu (100-1000 μ l) wstrzykiwano pod powierzchnię, po czym mieszano subfazę - bez naruszania monowarstwy - przy użyciu precyzyjnego mieszadła zamontowanego na dnie celi, tak by uzyskać stężenie peptydu c_0 w zakresie $2 \cdot 10^{-7}$ - $1 \cdot 10^{-5}$ mol/dm³. Proces penetracji badano w warunkach dyfuzji stacjonarnej, prowadząc rejestrację zmian czasowych ciśnienia powierzchniowego, Π -t, oraz elektrycznego potencjału powierzchni, ΔV -t, przez okres 120 min. po etapie iniekcji. Pomiar Π przeprowadzono metodą płytki Wilhelmy'ego, pomiar ΔV - metodą wibrującej płytki, przy zastosowaniu aparatury dostarczonej przez firmę KSV (Finlandia).

Określono zależność efektów penetracji od: i/ początkowej gęstości filmu, scharakteryzowanej przez równowagowe ciśnienie powierzchniowe, Π_t , ii/ stężenia peptydu, c_0 , oraz iii/ typu fosfolipidu: DPPC lub DPPG. W ogólności, proces penetracji powodował wzrost Π i obniżenie ΔV monowarstwy, co wskazuje na wzrost oddziaływań międzymolekularnych (wzrost Π) i re-orientację molekuł fosfolipidowych w filmie pod wpływem penetranta (tj. spadek ΔV w wyniku wzajemnej kompensacji dipoli molekularnych). Zmiany Π i ΔV spowodowane przez określony peptyd w monowarstwach utworzonych przez różne fosfolipidy były różne; Wyższy wzrost Π mierzono w monowarstwach DPPG, w porównaniu z DPPC, a w przypadku efektu ΔV , na odwrót, był on wyższy w filmie DPPC niż DPPG. To zróżnicowanie przypisano różnej strukturze grupy funkcyjnej fosfolipidu - czysto polarnej w molekułe DPPG i jonu obojnaczego w DPPC. Dla wszystkich przebadanych układów peptyd/fosfolipid, stwierdzono nieliniową zależność efektów penetracji - $\Delta \Pi$ i $\Delta \Delta V$, od gęstości fosfolipidu w filmie, Π_t , z dwoma naprzemiennymi maksimumami i minimumami. Przebiegi te wskazują na różne oddziaływania penetranta z różnymi 2D-fazami fosfolipidu, tworzącymi się w poszczególnych obszarach Π_t .

6.4. Adsorpcja cząstek biokoloidalnych na powierzchniach włókien polimerowych Etap II: Zależność selektywności adsorpcji od właściwości fizykochemicznych układu: adsorbent/ośrodek/ biokoloid

(doc. dr hab. Piotr Warszński, mgr Jerzy Superata)

Adsorpcja makromolekuł biologicznych na powierzchni zachodzi na ogół tym silniej, im większe jest ich dopasowanie przestrzenne i chemiczne względem struktury powierzchniowych centrów adsorpcyjnych. Dopasowanie chemiczne to komplementarność poszczególnych ugrupowań prowadząca do wzmocnienia oddziaływań o charakterze dipolowym, hydrofobo-wym, jonowym oraz do tworzenia wiązań wodorowych. Efektem sumarycznym jest obserwowane znamienne wydłużenie czasu kontaktu lub trwale osadzenie się molekuł adsorbentu na powierzchni adsorbenta. Równie istotna jest rola ciekłego ośrodka w którym zachodzi adsorpcja - jego skład w wielostronny sposób wywiera zasadniczy wpływ na wzmocnienie lub osłabienie oddziaływań z powierzchnią. W celu otrzymania najsilniej i najsSelektywniej adsorbującej powierzchni dla danego układu stosować można różne podejścia np.: dobór spośród dostępnych powierzchni, modyfikację fizyczną lub chemiczną istniejących powierzchni lub też syntezę lub konstrukcję nowej powierzchni. W przypadku biokoloidów wykorzystywać można istniejące dla nich naturalne receptory lub przeciwciała jako składniki centrów adsorpcyjnych.

Obecny eksperymentalny etap projektu poświęcony został poszukiwaniu prostych i ekonomicznych dróg wytwarzania warstw powierzchniowych w kontrolowany sposób. Jako procesy modelowe przeprowadzone zostały próby elektropolimeryzacji 1,2-diaminobenzenu oraz jego mieszanin z modyfikowanymi nanorurkami węglowymi. Wykonane następnie pomiary woltametryczne (CV) wykazały zróżnicowanie właściwości otrzymanych warstw w zależności od techniki elektropolimeryzacji (chronoamperometria vs CV – rys.1) oraz składu prekursorów (np. typu modyfikacji nanorurek – rys.2). Generalnie zaobserwowano, że nanorurki węglowe polepszały i stabilizowały parametry elektrochemiczne badanych warstw. Elektropolimeryzacja natomiast zasługuje na dalszą uwagę, ze względu na szybkość, powtarzalność i dobre możliwości kontroli parametrów procesu.

Fig. 1. CV: modified Pt microwire

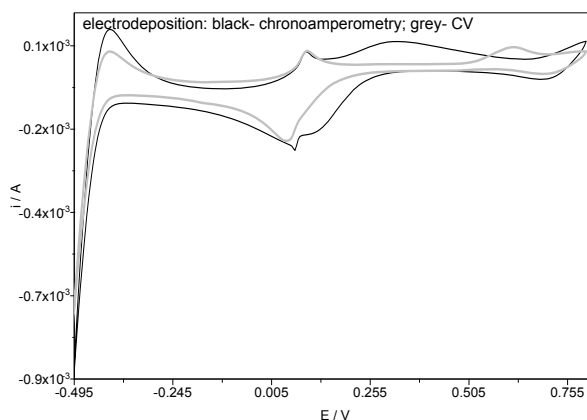
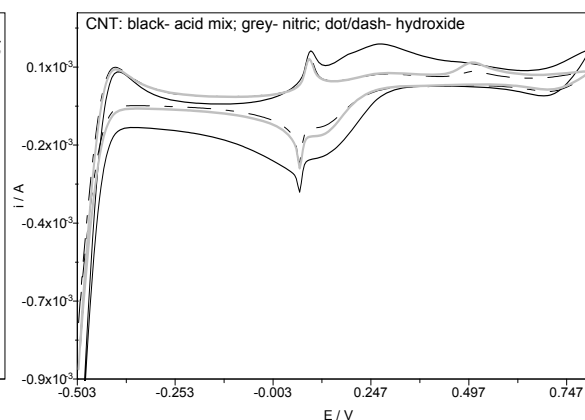


Fig.2. CV: modified Pt microwire



Prowadzone są również wstępne próby wykorzystania procesów samoorganizacji molekularnej do konstrukcji powierzchni adsorpcyjnych.

Dotychczasowe prace doprowadziły do zarysowania koncepcji zintegrowanego biosensora, w którym selektywna powierzchnia adsorpcyjna stanowiłaby warstwę receptorową, a ilość zaadsorbowanego liganda transformowana byłaby na zmianę sygnału generowanego w części efektorowej. Weryfikacja tej koncepcji planowana jest w kolejnych etapach projektu.

7. Struktury samoorganizujące się i monowarstwy nanocząstek

7.1. Wyznaczenie struktury i właściwości elektrokinetycznych warstewek adsorpcyjnych na powierzchniach heterogenicznych

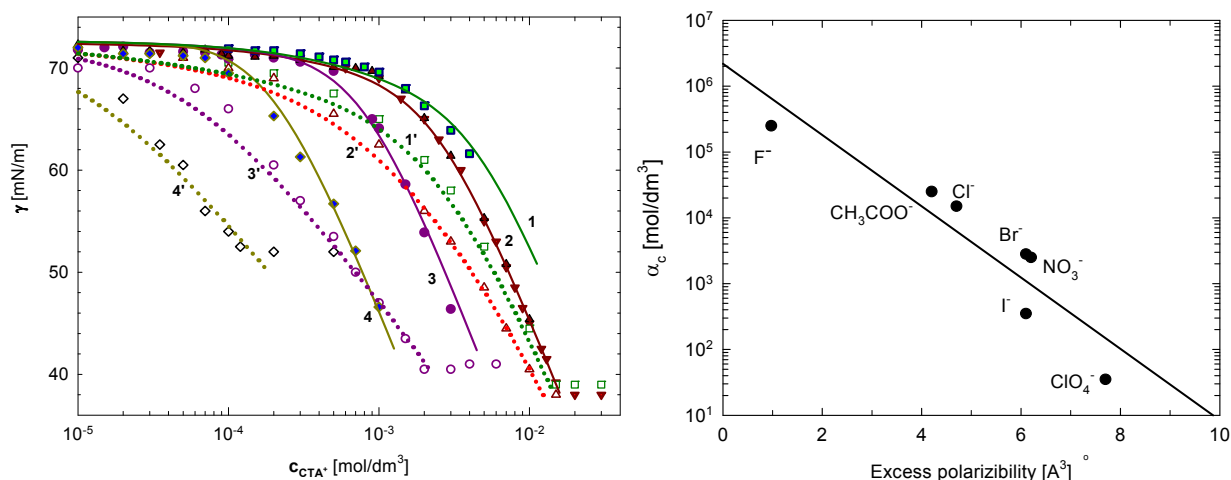
(prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk, dr Maria Zembala, dr Barbara Jachimaska, mgr Aneta Michna, tech. Elżbieta Porębska)

Naprzemienne nanoszenie warstewek polielektrolitów o charakterze kationowym i anionowym jest efektywną metodą wytwarzania filmów polimerycznych o określonej architekturze i funkcjonalności. Pomimo istotnego znaczenia tych procesów, mało jest znanych metod, które umożliwiają ilościową charakterystykę fizykochemiczną tych filmów, w szczególności homogeniczności rozkładu ładunku powierzchniowego. Taką metodą jest osadzanie cząstek koloidalnych w kontrolowanych warunkach hydrodynamicznych. Celem przeprowadzonych prac było więc wyznaczenie kinetyki adsorpcji i struktury monowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych wytwarzanych przez kontrolowane nanoszenie multiwarstw polielektrolitów. Pomiar potencjału zeta powierzchni heterogenicznych prowadzono w naczynku elektokinetycznym. Używano trzech rodzajów polielektrolitów: polietylenoiminu (PEI), chlorowodoru polialilaminy (PAH), obydwie o ciężarze cząsteczkowym 70 000 i charakterze kationowym, oraz poli-4-styrenosulfonianu sodu (PSS) o takim samym ciężarze cząsteczkowym i charakterze anionowym. Przeprowadzono obszerną charakterystykę fizykochemiczną polielektrolitów w roztworach wodnych obejmującą pomiary potencjału zeta, współczynnika dyfuzji (promienia hydrodynamicznego) oraz lepkości dynamicznej, co pozwoliło na wyznaczenie struktury cząsteczek polimerów. Kinetykę osadzania cząstek koloidalnych badano używając monodispersyjnych suspensji lateksów polistyrenowych w naczynku z napływem osiowo-symetrycznym. Wyznaczano początkowe szybkości osadzania cząstek lateksów o dodatnim i ujemnym ładunku powierzchniowym w zależności od stopnia pokrycia powierzchni polielektrolitem oraz jego potencjału zeta. Wykazano, że początkowa szybkość osadzania cząstek skorelowana była w ścisły sposób ze znakiem potencjału zeta warstwy polielektrolitu. W przypadku gdy potencjał zeta był przeciwny do ładunku cząstek strumień początkowy osiągał wartość maksymalną, odpowiadającą adsorpcji na powierzchniach homogenicznych. W przeciwnym przypadku (jednakowego znaku ładunku powierzchniowego cząstki i warstwy polielektrolitu), strumień cząstek był znacznie zredukowany, aczkolwiek niezerowy. Efekt ten interpretowano przy pomocy modelu teoretycznego, uwzględniającego lokalne fluktuacje rozkładu ładunku elektrycznego, podobnie, jak w przypadku adsorpcji cząstek na centrach. Oprócz pomiarów początkowej szybkości adsorpcji przeprowadzono też pomiary kinetyki dla długich czasów, wyznaczając pokrycie maksymalne cząstek w zależności od stopnia pokrycia powierzchni polielektrolitem, wykazując, że pokrycia maksymalne cząstek są ściśle skorelowane z pokryciem polimeru. Określono również strukturę warstewek adsorpcyjnych cząstek koloidalnych na powierzchniach pokrytych warstewkami polielektrolitów przy pomocy funkcji korelacyjnej rozkładu g . Wykazano, że funkcja korelacyjna uzyskana dla powierzchni heterogenicznych jest zbliżona do powierzchni homogenicznych, co wyklucza możliwość tworzenia klasterów powierzchniowych o rozmiarach makroskopowych. Innym ważnym wnioskiem jest to, że zastosowana metoda osadzania cząstek koloidalnych okazała się precyzyjnym narzędziem wykrywania heterogeniczności powierzchniowych w skali nano, w szczególności zaadsorbowanych polielektrolitów o stężeniu powierzchniowym rzędu 1% monowarstwy.

7.2. Wpływ polaryzowalności przeciwjonów na ich aktywność powierzchniową w obecności surfaktantów kationowych

(doc. dr hab. Piotr Warszyński, mgr Grażyna Para, mgr Ewelina Jarek, inż. Marzena Noworyta)

Badano wpływ obecności anionów; Cl^- , Br^- , F^- , I^- , NO_3^- , ClO_4^- , CH_3COO^- na napięcie powierzchniowe wodnych roztworów bromków n-alkilotrójmetyloamoniowych; C_{16}TABr , C_{12}TABr and C_{10}TABr . Do opisu wyników eksperymentalnych zastosowano opracowany wcześniej model adsorpcji quasi-dwuwymiarowego elektrolitu (STDE). W przeciwieństwie do dotychczasowych modeli adsorpcji, model ten bierze pod uwagę wpływ specyfiki przeciwjonu na adsorpcję, a w konsekwencji, na napięcie powierzchniowe jonowego surfaktantu. Otrzymano dobrą zgodność opisu teoretycznego i wyników doświadczalnych w szerokim zakresie stężeń surfaktantu i dodanego elektrolitu. Stwierdzono występowanie silnej zależności napięcia powierzchniowego od stężenia w zależności od rodzaju anionu. Największe obniżenie napięcia powierzchniowego przy ustalonym stężeniu surfaktantu powoduje obecność jonu chloranowego(VII), podczas gdy roztwory surfaktantu w obecności jonów fluorkowych wykazują najmniejsze obniżenie napięcia powierzchniowego. Przykładem otrzymanych wyników jest Rys.1 prezentujący aktywność powierzchniową kationów dodecylovych C_{12}TA^+ w zależności od rodzaju jonu obecnego w roztworze (występującego jako przeciwjon surfaktantu lub anion dodanego elektrolitu), która wzrasta w szeregu $\text{Cl}^- < \text{Br}^- < \text{I}^- < \text{ClO}_4^-$. Stwierdzono, że istnieją duże różnice w zdolności anionów do stymulacji adsorpcji kationowego surfaktantu która jest zgodna z szeregiem: $\text{F}^- < \text{CH}_3\text{COO}^- < \text{Cl}^- < \text{Br}^- < \text{NO}_3^- < \text{KI}^- < \text{KClO}_4^-$, odpowiadającym szeregowi aktywności anionów Hofmeistera. Stwierdziliśmy istnienie korelacji parametru “aktywności powierzchniowej jonu” α_c , który jest miarą zdolności penetracji warstwy powierzchniowej przez jony, z nadmiarową polaryzowalnością α_p . Otrzymaną korelację przedstawia Rys. 2. Wyniki wskazują, że specyficzny wpływ anionów na adsorpcję surfaktantu może być wyjaśniony różnicą w zdolności penetracji warstwy Sterna przez poszczególne aniony. Aniony, które łatwo penetrują warstwę Sterna, efektywniej neutralizują ładunek powierzchniowy zaadsorbowanego powierzchniowo aktywnego kationu i obniżają potencjał powierzchniowy. Na skutek neutralizacji, więcej jonów surfaktantu może się adsorbować na granicy faz. Zjawisko penetracji jonów do warstwy Sterna dobrze opisuje stosowany model adsorpcji.



Rys.1. Porównanie równowagowych izoterm adsorpcji; 1 – DTACl, 2 – DTABr, 3 – DTAI and 4 DTAClO₄ z izotermami dla DTABr w 10⁻² M roztworach : 1' - KCl, 2' – KBr, 3 – KJ, 4' – KClO₄, linie reprezentują wyniki dopasowania modelu adsorpcji STDE.

Rys.2. Korelacja parametru aktywności powierzchniowej α_c anionów z nadmiarową polaryzowalnością α_p .

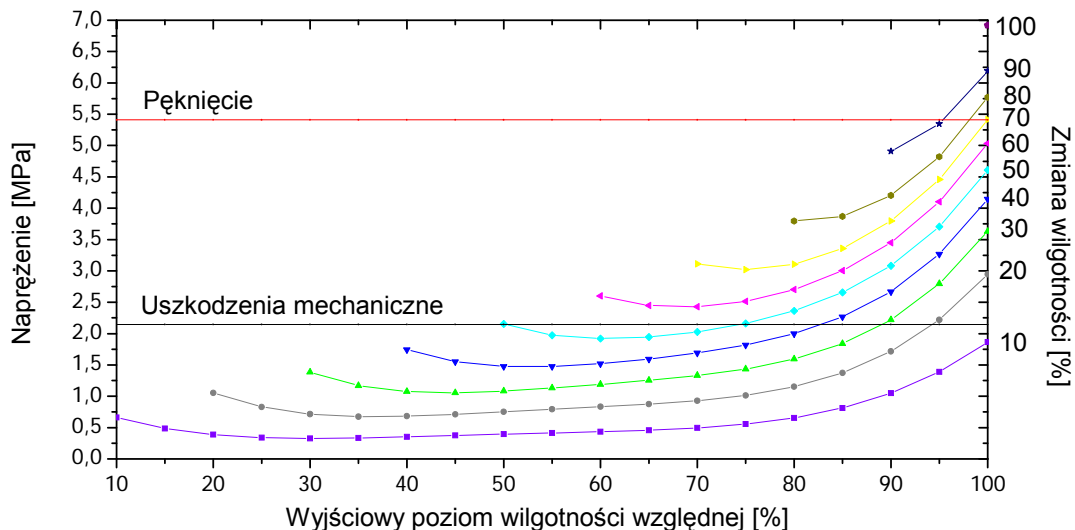
8. Badania nad ochroną dziedzictwa kultury

8.1. Określenie bezpiecznych wielkości i częstotliwości fluktuacji parametrów powietrza w otoczeniu zabytków drewnianych

(doc. dr hab. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, dr Antonina Kozłowska,
mgr Sławomir Jakiela)

Zakończono opracowanie modelu matematycznego pozwalającego na obliczanie naprężeń mechanicznych pojawiających się w przekroju elementów drewnianych pod wpływem fluktuacji parametrów klimatycznych powietrza – wilgotności względnej i temperatury. Uzyskano zadawalający model transportu wilgoci w drewnianych elementach i obiektach w odpowiedzi na fluktuacje klimatyczne, opierając się na wyznaczonych laboratoryjnie parametrach absorpcji i dyfuzji pary wodnej w drewnie. Otrzymano realne rozkłady wilgoci w przekroju elementów drewnianych, a szczególnie zmiany w zawartości wilgoci w warstwie bliskiej powierzchni, która jest wrażliwa na szybkie fluktuacje mikroklimatu otoczenia. Obliczono wewnętrzne naprężenia, jakie pojawiają się w rezultacie niejednorodnego rozkładu wilgoci.

Posługując się opracowanym modelem określono wartości progowe zmian klimatycznych powyżej których pojawiają się deformacje i zniszczenia mechaniczne drewna. Dokonano tego przez porównanie obliczonych naprężeń z wytrzymałością mechaniczną różnych gatunków drewna występujących w zabytkach wyznaczonych laboratoryjnie. Obliczenia prowadzono dla cylindrycznego obiektu drewnianego o średnicy większej niż 5 cm dla szybkich zmian wilgotności względnej, gdyż w tych warunkach generowane są największe naprężenia. Wynik opisanych działań badawczych stanowi mapa naprężeń z zaznaczeniem obszarów fluktuacji wilgotności powietrza, w których następuje zagrożenie drewna zniszczeniem. Mapa zagrożeń dla drewna lipowego jest przedstawiono na poniższej ilustracji.



PROJEKTY BADAWCZE WŁASNE

1. Synteza eterów trzeciorzędowych na heteropolikwasach typu Dawsona jako katalizatorach

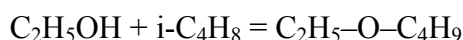
(*prof. dr hab. Adam Bielański*)

Projekt badawczy 4 T09A 099 23 [2002-2005]

Celem prac podjętych w ramach projektu badawczego 4 T09A 0099 23 było zbadanie na przykładzie syntezy eteru etylo-*tert*-butylowego (ETBE), z izobutenu i etanolu, przebiegu addycji elektrofilowej na heteropolikwasie $H_6P_2W_{18}O_{62}$ typu Wellsa-Dawsona jako katalizatorze. Ten rodzaj heteropolikwasu uważany w literaturze za wykazujący korzystniejsze właściwości katalityczne niż dotąd używane dodekaheteropolikwasy typu Keggina budzi w ostatnich latach duże zainteresowanie. O wyborze syntezy ETBE zdecydował fakt, że eter ten w przyszłości częściowo może zastąpić eter metylo-*tert*-butylowy (MTBE) stanowiący obecnie najważniejszy składnik przeciwstukowy bezołowiowych benzyn samochodowych.

Klasyczne badania katalityczne heteropolikwasu czystego oraz wprowadzonego na nośniki zostały oparte o kompleksowe badania fizykochemiczne. W szczególności posłużono się analizą termiczną TG/DTA, mikrokalorymetrią, spektrometrią FTIR katalizatorów oraz cząsteczek zaadsorbowanych, badaniami rozwinięcia powierzchni i struktury kapilarnej, rentgenowską analizą strukturalną oraz mikroskopią skaningową.

Wszystkie katalizatory badane w fazie gazowej metodą przepływową okazały się wysoce aktywne już w temperaturze 40 do 50 °C zachowując cały czas selektywność bliską 90% przereagowania izobutenu do ETBE. W testach politermicznych katalizatory wykazywały maksimum aktywności w temperaturze około 60 °C. Przy stałej temperaturze (40 °C) wykazywały one stałą aktywność i selektywność w ciągu testów trwających do 6-ciu godzin. Ważnym osiągnięciem badań na czystych hydratách heteropolikwasu było wykazanie roli wody krystalizacyjnej, formalnie nieuczestniczącej w reakcji



jako czynnika modyfikującego tzw. strukturę drugorzędową heteropolikwasu i w ten sposób wpływającą na jego właściwości sorpcyjne i katalityczne.

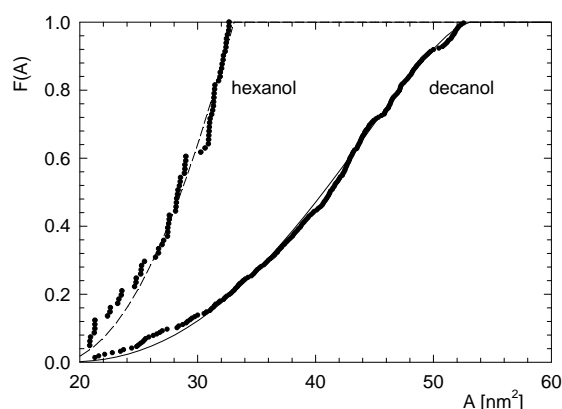
W katalizatorach nośnikowych (nośniki SiO_2 i TiO_2 różniące się rozwinięciem powierzchni i strukturą kapilarną) aktywność odniesiona do masy heteropolikwasu jest większa niż w przypadku heteropolikwasu bez nośnika. Ten wzrost aktywności wiąże się z rozdrobnieniem masy katalitycznie czynnej. Heteropolikwas na nośnikach występuje bowiem w postaci nanokrystalitów łatwo penetrowanych przez absorbowane cząsteczki etanolu, podczas gdy proces ten w krystalitach czystego heteropolikwasu o rozmiarach rzędu 10 μm jest powolniejszy. Pewne różnice w zachowaniu się katalizatorów osadzonych na SiO_2 i TiO_2 , jak wykazano, wynikają z różnic w ustroju kapilarnym obydwu nośników.

2. Wpływ struktury molekularnej substancji powierzchniowo aktywnych na ich adsorpcję i samoorganizację na ciekłych granicach międzyfazowych

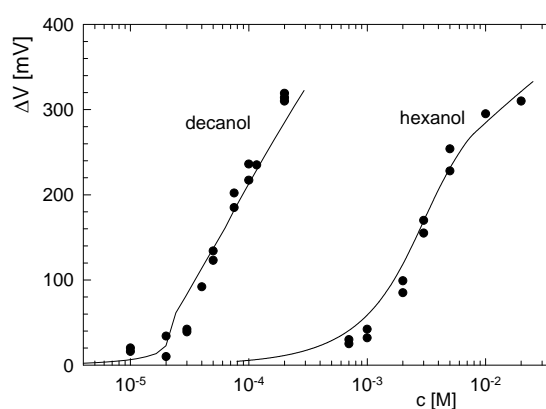
(doc. dr hab. Piotr Warszyński)

Projekt badawczy 4 T09A 038 24 [2003-2005]

Uwzględnienie struktury molekularnej surfaktantu oraz zmian konformacyjnych cząsteczek zachodzących w warstwie adsorpcyjnej wymaga opracowania udoskonalonego modelu adsorpcji dającego poprawny opis kształtu izoterm nie tylko napięcia powierzchniowego ale również potencjału elektrycznego powierzchni międzyfazowej. Potencjał ten jest wielkością szczególnie czułą na zmiany konformacyjne cząsteczek surfaktantu w warstwie powierzchniowej. Zaproponowano nowy model adsorpcji surfaktantów niejonowych oparty na izotermie HFL opisującej niezlokalizowaną adsorpcją oddziałujących twardych dysków. Model ten uwzględnia zmiany efektywnego pola powierzchni zajmowanej przez cząsteczki w poszczególnych konformacjach. Jeżeli stężenie powierzchniowe surfaktantu jest niskie wszystkie dozwolone konformacje są możliwe. Wraz ze wzrostem stężenia powierzchniowego prawdopodobieństwo przyjmowania przez cząsteczki konformacji zajmujących dużą powierzchnie jest silnie obniżone. Ta zmiana prawdopodobieństwa prowadzi do pojawienia się dodatkowych członów entropowych w swobodnej entalpii adsorpcji, nieuwzględnionych w stosowanych do tej pory modelach adsorpcji niejonowych surfaktantów. Wyniki symulacji prowadzonych metodą dynamiki molekularnej przy zastosowaniu pola sił Amber99 zawartego w pakiecie HYPERCHEM 7.5 wskazują, że rozkład pól zajmowanych na powierzchni przez cząsteczki alkanoli może być przybliżony rozkładem beta, co zostało zilustrowane na Rys. 1 dla heksanolu i dekanolu. Biorąc pod uwagę otrzymane rozkłady pól zajmowanych przez cząsteczki surfaktantów w poszczególnych konformacjach, na podstawie zaproponowanego modelu adsorpcji, możemy obliczyć izoterm napięcia i potencjału powierzchniowego. Rysunek 2 przedstawia porównanie izoterm potencjału powierzchniowego dla roztworów heksanolu i dekanolu obliczonych na podstawie modelu i otrzymanych doświadczalnie metodą wibrującej elektrody przy zastosowaniu zbudowanego przez nas układu pomiarowego. Otrzymano dobrą zgodność pomiędzy obliczeniami modelowymi a wynikami eksperymentu zarówno dla izoterm potencjału jak i napięcia powierzchniowego



Rys. 1. Porównanie rozkładów pól powierzchni zajmowanych przez poszczególne konformacje cząsteczek heksanolu i dekanolu.



Rys. 2. Porównanie izoterm potencjału powierzchniowego dla heksanolu i dekanolu. Punkty – wyniki pomiarów metodą wibrującej elektrody, linie – wyniki obliczeń teoretycznych

3. Opis teoretyczny ewolucji czasowej układów adsorpcyjnych z powierzchnią energetycznie/strukturalnie heterogeniczną

(prof. dr hab. Władysław Rudziński)

Projekt badawczy 4 T09A 015 24 [2003-2006]

W ramach realizacji kolejnego zadania projektu kontynuowano badania nad wpływem strukturalnej niejednorodności powierzchni na dynamikę procesu adsorpcji/desorpcji. W przygotowaniu jest praca dotycząca wpływu defektów powierzchniowych uzyskanych przez naświetlanie wiązką laserową na dynamikę procesu termodesorpcji asocjatywnej. Rozpoczęto również badania dotyczące wpływu wymiaru fraktalnego powierzchni na częstotliwość kolizji molekuł gazu z tego typu, wysoce geometrycznie niejednorodną, powierzchnią. Częstotliwość kolizji molekuł gazu z powierzchnią jest najbardziej elementarnym parametrem mającym wpływ na szybkość adsorpcji. W przypadku powierzchni płaskich parametr ten jest dany prostym wyrażeniem wynikającym z teorii kinetycznej gazów (ograniczamy się do przypadku gazu doskonałego), natomiast nie jest jasne jak ta częstotliwość będzie się zmieniać w sytuacji, gdy struktura geometryczna powierzchni nie da się opisać przy pomocy elementarnych brył geometrycznych. Badania te prowadzone są przy zastosowaniu symulacji komputerowych (dynamika molekularna).

W ramach realizacji zadania projektu opublikowano pracę, w której przeanalizowano dokładność, stosowanego do tej pory, przybliżenia kondensacyjnego w uogólnianiu równań kinetycznych SRT (Statistical Rate Theory) na przypadek powierzchni energetycznie niejednorodnych. Wykazano, że w przypadku bardzo małych i bardzo dużych pokryć powierzchni przybliżenie kondensacyjne może nie być wystarczająco dokładne, wówczas należy posługiwać rozwiązaniami dokładnymi, które mają tę wadę, iż nie prowadzą do prostych analitycznych wyrażeń uzyskiwanych na bazie przybliżenia kondensacyjnego. W pracy tej wykazano również, że zastosowanie SRT do analizy kinetyki sorpcji w materiałach porowatych prowadzi do równie dobrej zgodności jak zastosowanie modelu dyfuzji powierzchniowej. Co więcej, graniczna postać równań kinetycznych SRT (zarówno dla powierzchni energetycznie jednorodnych jak i energetycznie heterogenicznych) dla bardzo małych czasów prowadzi do uzyskania zależności typu $t^{1/2}$, czyli zależności typowej dla procesów dyfuzyjnych. Sugeruje to, że linowa zależność ilości zaadsorbowanej w funkcji pierwiastka z czasu nie jest dowodem na to, że proces jest rządzony dynamiką dyfuzji powierzchniowej, co jest powszechnie uznawane. Wyniki powyższych badań zostały opublikowane w czasopiśmie *J. Phys. Chem. B*, (Rudziński W., Pańczyk T., Płaziński W., *J. Phys. Chem. B* 109 (2005) 21868).

4. Synteza powłok ferrierytowych na podłożach metalowych metodą *in situ* i określenie ich właściwości fizykochemicznych

(doc. dr hab. Bogdan Sulikowski)

Projekt badawczy 4 T08C 036 25 [2003-2006]

Otrzymanie aktywnego katalizatora pracującego w trudnych warunkach w procesie usuwania tlenków azotu wymaga opracowania technologii nanoszenia fazy zeolitowej na odpowiednie podłoże. Analiza wskazała na celowość zastosowania do tego procesu katalizatora monolitycznego. Natomiast z uwagi na procesy przenoszenia masy, ciepła oraz technologię produkcji katalizatorów, jako materiał na podłoże wytypowano metale i ich stopy. Celem niniejszego projektu jest zbadanie warunków otrzymywania i właściwości powłok zeolitowych syntetyzowanych metodą *in situ* na wybranych podłożach metalowych i stopach. Zakres badań obejmuje zagadnienia związane z fizykochemią zeolitów, ich syntezą na metalach i ich stopach, oddziaływaniami występującymi pomiędzy zeolitem a podłożem, oraz właściwościami samego podłoża metalicznego po odpowiedniej obróbce powierzchniowej.

Badania wykonane uprzednio wykazały, że na wielkość pokrycia podłoża metalowych warstwą zeolitu decydujące znaczenie ma starzenie żelu w temperaturach poniżej właściwej syntezy hydrotermalnej. W 2005 r. kontynuowano badania wpływu zarodkowania na tworzenie się i wielkość kryształów ferrierytu na podłożach metalicznych. Prowadzono też badania samych podłoży utlenianych w powietrzu i SO₂. Wykonano badania mające na celu zmniejszenie wielkości kryształów zeolitu. Ponadto otrzymano trwałe powłoki ferrierytowe metodą syntezy z żelu w parach szablonu organicznego. Podstawowym materiałem na podłoże do syntezy zeolitu była folia żelazowo-chromowo-glinowa.

Optymalizację krystalizacji ferrierytu prowadzono w szerokich granicach temperatur 60-160°C, zmieniając czas starzenia i sposób podnoszenia temperatury w autoklawach. Istotne znaczenie mają właściwości mechaniczne utworzonej warstwy zeolitu. Badano zatem warunki prowadzące do zmniejszenia kryształów zeolitu, co wpływa na stabilność mechaniczną warstwy. Zastosowano trzy sposoby modyfikacji procesu syntezy ferrierytu: zmianę czasu syntezy, synteza w warunkach rotacji autoklawu oraz zmianę składu chemicznego żelu. Wielkość kryształów ferrierytu oceniano metodami mikroskopii skaningowej i dyfrakcji laserowej. W wyniku badań określono warunki prowadzące do znacznie mniejszych kryształów (do 70%) w porównaniu do syntezy standardowej.

Metodą mikroskopii sił atomowych określono wielkość adhezji kryształów ferrierytu do powierzchni podłoża metalowych. Wielkość adhezji mierzono jako maksimum na krzywej Gaussa otrzymanej z ponad 100 pomiarów.

Aby polepszyć właściwości mechaniczne uzyskiwanych powłok ferrierytowych wykonano syntezy z żelu w parach szablonu organicznego. Żel uzyskany wcześniej opracowaną metodą nanoszono na podłoże, suszono i umieszczano w autoklawie w obecności pary wodnej i pary szablonu strukturotwórczego. Nanoszenie żelu wykonywano w kontrolowanych warunkach metodą dip-coating. Otrzymane warstwy ferrierytu miały grubość 5-25 μm i pokrycie do 31 m²/g. Modyfikując procedurę nakładania żelu uzyskano pokrycie zeolitem rzędu 45-161 m²/g, przy grubości warstwy 25-100 μm. Wielkość kryształów w warstwie regulowano zmieniając sposób przygotowania żelu przed nałożeniem na podłoże (czas starzenia, wstępna synteza hydrotermalna).

5. Mechanizmy tworzenia monowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych i przewodzących

(prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk)

Projekt badawczy 4 T09A 076 25 [2003-2005]

Wyznaczono kinetykę adsorpcji cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych. Pomiary prowadzono przy użyciu nowego typu naczynka pomiarowego, charakteryzującego się ukośnym napływem strumienia cieczy na powierzchnię graniczną (oblique impinging-jet OBIJ). Główną zaletą naczynka, w porównaniu z poprzednio stosowanymi jest możliwość bezpośrednich obserwacji mikroskopowych procesu osadzania cząstek *in situ* przez warstewkę suspensji przy użyciu obiektywu długoogniskowego. W pomiarach używano dwu typów powierzchni heterogenicznych: mika pokryta multiwarstwami polielektrolitów (anionowy PSS oraz kationowy PAH o ciężarze cząsteczkowym 70.000) oraz powierzchni tytanu modyfikowanego elektrokrochemicznie. Folia tytanowa (o zawartości 99.6% czystego Ti rozmiarach 50 x 50 mm, grubość 0,03 mm) była pasywowana na drodze utleniania anodowego w buforze fosforanowym przy pH=7.4 i nadnapięciu 80 V. W ten sposób wytwarzano warstewkę tlenu tytanu o grubości 150 nm i nierówności powierzchniowej rzędu 17 nm. Uzyskane powierzchnie charakteryzowano przy pomocy pomiaru potencjału przepływu przy pomocy pary elektrod Ag/AgCl, używając elektrometru Keithley 6512. Pomiar potencjału przepływu oraz przewodnictwa elektrycznego naczynka umożliwiały wyznaczenie potencjału zeta powierzchni, będącego precyzyjną miarą stopnia pokrycia. Kąt zwilżania, charakteryzujący stopień hydrofobowości powierzchni wyznaczano po naniesieniu multiwarstw elektrolitów i wysuszeniu warstwy w warunkach kontrolowanej wilgotności metodą kształtu kropli. Używano specjalnego oprogramowania bazującego na aproksymacji kształtu kropli przy pomocy wielomianu wyższego stopnia. Multiwarstwy polielektrolitów adsorbowano metodą warstwa po warstwie z roztworów NaCl o kontrolowanym stężeniu. Wykazano, że po utworzeniu dwuwarstwy występowały periodyczne zmiany potencjału zeta powierzchni między ujemnymi i dodatnimi wartościami, odpowiadającymi potencjałowi zeta polielektrolitów wyznaczonych w głębi roztworu. Wykazano, że wartości potencjału zeta był skorelowany ściśle z wartościami kąta zwilżania, który przyjmował wartość 70° dla PAH oraz 40° dla PSS. Przeprowadzono też pomiary stabilności filmów polielektrolitów, wyznaczając wpływ przemywania roztworem elektrolitu. Wykazano, że zarówno dla tytanu, jak i miki, warstwy zakończone PSS były znacznie bardziej stabilne, niż warstwy zakończone PAH. Dalsza charakterystyka powierzchni heterogenicznych obejmowała pomiary kinetyki osadzania cząstek modelowych suspensji koloidalnych modyfikowanych przez adsorpcję polielektrolitów. Wyznaczono lokalne współczynniki przenoszenia masy w zależności od geometrii naczynka (kąta nachylenia kapilary wlotowej), szybkości przepływu suspensji określanej liczbą Reynoldsa oraz siły jonowej. Wykazano, że równomierne warunki transportu cząstek obejmują znacznie większy obszar, niż w poprzednio stosowanych naczynkach, co w znaczącym stopniu polepsza precyzję prowadzonych pomiarów. Stwierdzono też, że występuje ścisła korelacja pomiędzy zmianami potencjału zeta powierzchni, zmianami kąta zwilżania, a kinetyką osadzania cząstek koloidalnych. Tak więc, uzyskane wyniki wykazały jednoznacznie że metoda oparta na pomiarach szybkości osadzania cząstek może być wykorzystana do bardzo precyzyjnego wyznaczenia stopnia heterogeniczności powierzchni.

6. Zastosowanie fluorowego układu dwufazowego FBS (Fluorous Biphasic System) do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów

(prof. dr Jerzy Haber)

Projekt badawczy 3 T09B 122 26 [2004-2007]

Jednym z najważniejszych zagadnień katalizy homogenicznej jest problem oddzielania katalizatora od produktów reakcji. Powszechnie używana metoda oddzielania przez destylację wymaga stosowania wysokiej temperatury. Fluorowa kataliza dwufazowa (FBC) jest stosunkowo nową metodą pozwalającą na łatwe oddzielanie katalizatorów i ich ponowne użycie. Katalizatory z długimi łańcuchami fluorowymi są tylko rozpuszczalne w rozpuszczalnikach fluorowych. Reagenty są dodawane w rozpuszczalnikach organicznych, które nie mieszają się z rozpuszczalnikami fluorowymi w temperaturze pokojowej. Po ogrzaniu układ dwufazowy staje się układem homogenicznym co pozwala na zajście reakcji katalitycznej, po ochłodzeniu następuje oddzielenie fazy fluorowej od fazy organicznej. Faza fluorowa z katalizatorem może być ponownie użyta z fazy organicznej można wydzielić produkty reakcji.

Utlenianie węglowodorów tlenem molekularnym przy zastosowaniu kompleksów makrocyklicznych jako katalizatorów jest jedną z najbardziej atrakcyjnych metod w syntezie organicznej. Podstawowa trudność, która uniemożliwia zastosowanie kompleksów makrocyklicznych na szeroką skalę w procesach utleniania jest ich recykling. Jedną z metod pozwalającą na rozwiązanie tego problemu jest kataliza w dwufazowym układzie fluorowym. Wykonano syntezę makrocyklicznych kompleksów: metaloporfiryn z łańcuchami fluorowymi i zastosowano je jako katalizatory epoksydacji alkenów tlenem molekularnym.

Katalizatory te były badane metodami spektroskopii UV-Vis, EPR and FTIR. Związki te są rozpuszczalne w niektórych rozpuszczalnikach fluorowych takich jak perfluoroheksan, perfluoro(metylocykloheksan) czy perfluorodekalina. Kompleksy fluorowe stosowano jako katalizatory epoksydacji cykloalkenów w układzie dwufazowym perfluoroheksan/CH₃CN tlenem molekularnym i w obecności aldehydu jak odczynnika redukującego. Reakcje epoksydacji prowadzono w temperaturze pokojowej i pod ciśnieniem normalnym O₂. Wszystkie metaloporfiryny były aktywne w badanej reakcji epoksydacji. Głównym produktem był epoksyd. Reakcji nie zachodzi w przypadku nieobecności katalizatora. Konwersja substratów i wydajność do epoksydu była wysoka i wynosiła ok. 80-100 % dla cykloheksenu i cyklooktenu. Katalizator makrocykliczny był recyklowany i ponownie użyty w reakcji epoksydacji bez spadku konwersji substratu lub wydajności do epoksydu, co wskazuje, że metaloporfiryna nie traci swojej aktywności katalitycznej w czasie procesu utleniania.

Otrzymane rezultaty pokazują, że aktywność perfluorowanych katalizatorów zależy od charakteru centrum metalicznego, rodzaju łańcucha fluorowego i rodzaju podstawników w pierścieniu makrocyklicznym.

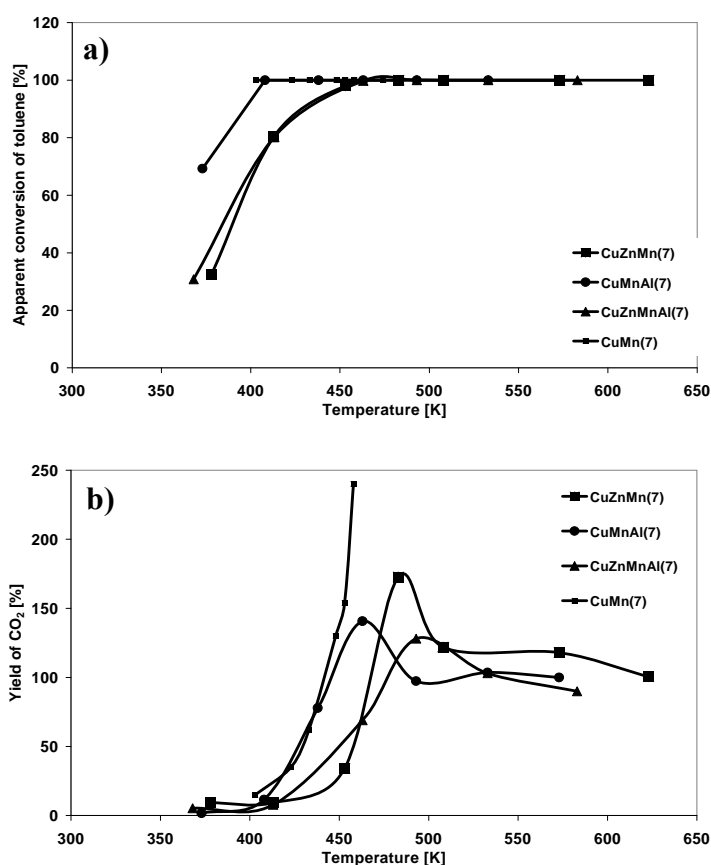
Druga część tej pracy to synteza metaloftalocyjanin z łańcuchami. Kompleksy żelaza, manganu, kobaltu, miedzi i niklu otrzymano przez kondensację odpowiedniej metaloporfiryny z jodkiem perfluoroalkilowym. Zsyntezowano osiem kompleksów: proste ftalocyjaniny Mn(Pc), Fe(Pc), Co(Pc), Cu(Pc) i Ni(Pc) z łańcuchami perfluorowymi, ftalocyjaniny żelaza, manganu i kobaltu z grupami nitro i z łańcuchami perfluorowymi. Otrzymane katalizatory były badane metodami spektroskopii UV-Vis, EPR and FTIR. Związki te są rozpuszczalne w niektórych rozpuszczalnikach fluorowych, takich jak perfluoroheksan, perfluoro(metylocykloheksan) czy perfluorodekalina i nierozpuszczalne w większości rozpuszczalników organicznych.

7. Podstawy technologii otrzymywania złożonych materiałów tlenkowych do neutralizacji par toksycznych rozpuszczalników

(dr inż. Alicja Michalik)

Projekt badawczy 3 T08D 003 26 [2004-2005]

W świetle znanych, unikatowych właściwości mieszanych faz tlenkowych otrzymanych z prekursorów typu hydrotalkitu, podjęto próbę syntezy takich prekursorów zawierających miedź i mangan, w celu zaprojektowania katalizatorów do usuwania lotnych związków organicznych. Do syntezowanych materiałów dodawano cynk lub glin, aby ułatwić powstanie struktury hydrotalkitowej. Próbki otrzymano przez współstrącanie zasadą przy stałym $\text{pH}=7$ z roztworów odpowiednich azotanów, przy zachowaniu stosunku $(\text{Cu}+\text{Zn})/(\text{Mn}+\text{Al})$ równego 2. Otrzymano układy oznaczone $\text{CuMn}(7)$, $\text{CuZnMn}(7)$, $\text{CuMnAl}(7)$ i $\text{CuZnMnAl}(7)$, o zamierzonych składach: $\text{Cu}:\text{Mn}=2$, $\text{Cu}:\text{Zn}:\text{Mn}=5:1:3$, $\text{Cu}:\text{Mn}:\text{Al}=6:2:1$ i $\text{Cu}:\text{Zn}:\text{Mn}:\text{Al}=4:2:2:1$. Przed testami katalitycznymi prekursory zostały



Rys. 1. Aktywność w spalaniu toluenu i wydajność CO_2 na mieszanych układach tlenkowych

sorpca toluenu. Spalanie adsorbentu następujące w wyższych temperaturach jest odpowiedzialne za obserwowaną w pewnych zakresach temperatury ponad stu procentową wydajność CO_2 (Rys. 1b). Analiza przebiegu wykresów wydajności CO_2 pozwala stwierdzić, że dodatek Al wpływa korzystnie na właściwości katalityczne, ponieważ mniejszy nadmiar CO_2 wytwarzany w temperaturach wyższych świadczy o redukcji niepożądanego ze względów praktycznych (możliwość eksplozji) zjawiska sorpcji toluenu przez katalizator.

poddane trzygodzinnej kalcynacji na powietrzu w 673 K. W zależności od składu preparatu w prekursorach identyfikowano fazy typu hydrotalkitu, podwójną warstwową sól oraz ZnO . Obecność glinu sprzyjała powstawaniu struktury hydrotalkitowej. W mieszaninie tlenkowej otrzymanej po kalcynacji można było zidentyfikować CuO o różnym stopniu krystaliczności, oraz ślady ZnO w układach zawierających cynk. Nie zaobserwowano żadnych krystalicznych faz zawierających Mn lub Al.

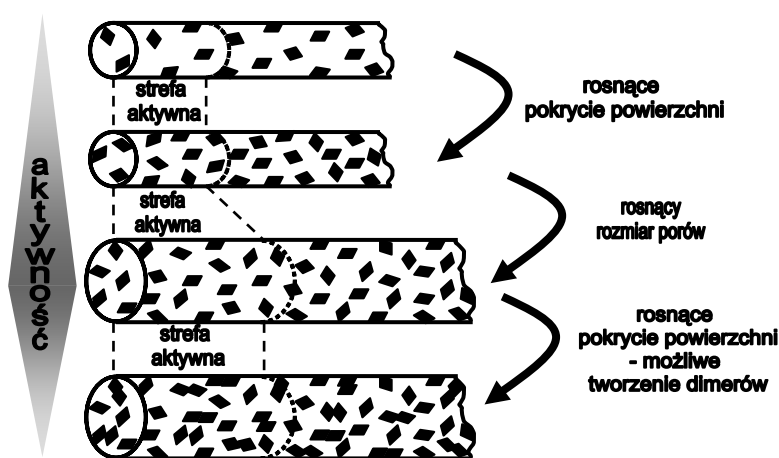
Wszystkie katalizatory okazały się niezwykle aktywne w testowej reakcji spalania toluenu. Niektóre osiągały 100% konwersji już w temperaturze 403 K (Rys. 1a). Dodatek Zn pogarszał aktywność układu katalitycznego, natomiast dodatek Al nie odbijał się negatywnie na aktywności katalizatorów. W zakresie niższych temperatur (poniżej 450 K) reakcji katalitycznej towarzyszyła silna

8. Mezoporowate nośniki krzemionkowe jako narzędzie do sterowania procesami katalizowanymi przez makrocycliczne metalokompleksy

(prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Projekt badawczy 3 T09B 066 26 [2004-2007]

W drugim roku realizacji grantu skoncentrowano się na badaniu reakcji utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym, katalizowanej przez kationową metaloporfirynę MnTMPyP osadzoną na aluminowanych sitach molekularnych typu HMS, MCN-41 i SBA-15. Reakcję prowadzono w reaktorze ze stali nierdzewnej, w temperaturze 120°C, pod ciśnieniem 10 atm. Używano 60 ml cyklooktanu przy stosunku cyklooktan:tlen=6.5. W każdym eksperymencie naważka katalizatora była dobierana tak, aby ilość wprowadzonej metaloporfiryny wynosiła 1.1 μ mol. Głównym produktem reakcji był cyklooktanon, któremu towarzyszyły niewielkie ilości cyklooktanolu. Selektywność do cyklooktanonu obserwowana dla katalizatorów Mn(TMPyP)/AlHMS i Mn(TMPyP)/AlMCM-41 ($\geq 95\%$) była wyższa niż dla układów MnTMPyP/AlSBA-15 i dla nienaniesionej metaloporfiryny (poniżej 90%). Efekt został wytłumaczony jako rezultat stereoselektywności wymuszonej przez względnie wąskie kanały nośników typu HMS i MCM-41. Utlenianie węglowodorów cyklicznych jest reakcją łańcuchową, inicjowaną w drodze aktywacji cząsteczki węglowodoru przez metaloporfirynę, co prowadzi do powstania rodników cykloalkilowych. W obecności molekularnego tlenu reakcja rozgałęzia się dając z jednej strony cyklooktanon jako efekt transformacji kompleksu metaloporfiryna-cykloalkilowodoronadtlenek, a z drugiej prowadząc do cyklooktanolu przez przekształcenie samego cykloalkilowodoronadtlenku. Na podstawie otrzymanych wyników postulujemy, że ta ostatnia reakcja jest utrudniona w ograniczonej przestrzeni wąskich mezoporów, ponieważ rodniki cykloalkilowe pozostają dłużej spułapkowane w sąsiedztwie metaloporfiryny, w wyniku czego ścieżka reakcji z udziałem kompleksu metaloporfiryna-cykloalkilowodoronadtlenek, prowadząca do cyklooktanonu jest uprzywilejowana. Aktywność katalizatorów wzrastała wraz ze wzrostem średnicy porów nośnika, co wskazuje na istnienie ograniczeń dyfuzyjnych malejących wraz ze wzrostem rozmiaru kanałów. Aktywność katalityczna zależała także od powierzchniowej gęstości centrów metaloporfirynowych. Wzrost pokrycia metaloporfiryną powyżej 0.5 monowarstwy prowadził do zmniejszenia aktywności katalitycznej, co zostało przypisane tworzeniu nieaktywnych dimerów. Naniesione katalizatory metaloporfirynowe mogły być ponownie użyte, zachowując 70-75% swojej aktywności.



Ilustracja wpływu stopnia pokrycia powierzchni nośnika metaloporfiryną i rozmiaru porów na aktywność katalityczną układów Mn(TMPyP)/aluminowane mezoporowate sita krzemionkowe

9. Struktura i aktywność enzymatyczna syntazy kwasu klawaminowego: teoretyczne badanie mechanizmu reakcji katalitycznej

(prof. dr hab. Ewa Brocławik)

Projekt badawczy 2 P04A 042 26 [2004-2006]

Prace związane z projektem są kontynuacją wcześniej prowadzonych obliczeń DFT w ramach tego samego projektu mającego na celu rozwikłanie mechanizmu biosyntezy kwasu klawaminowego katalizowanej przez trójfunkcyjny enzym – syntazę kwasu klawaminowego (CS, niehemowy enzym zależny od α -ketoglutaranu (α -KG)). Prowadzone obecnie prace skupiają się na możliwie wiernym odtworzeniu dostępnych widm (opublikowanych w szeregu prac w grupie prof. Salomona) - formy natywnej enzymu, ze związanym kosubstratem α -KG (2-oksoglutaranem) oraz kosubstratem wraz z właściwym substratem. Modele, które najlepiej odtworzą energie szukanych przejść elektronowych zostaną następnie użyte do dalszych obliczeń mających na celu rozwikłanie mechanizmu reakcji. Równoległe do obliczeń białka kontynuowane są prace nad układami modelowymi zawierającymi żelazo na różnym stopniu utlenienia oraz ligandy mające symulować zachowanie białka (symulowanie widm UV-VIS, Ramana oraz przesunięcia izotopowego).

W obliczeniach struktury elektronowej syntazy kwasu klawaminowego (CS) zastosowano innowacyjne i nowe podejście, w którym badany układ jest podzielony na dwa podukłady, jeden ρ_a liczony z większą dokładnością oraz drugi ρ_b traktowany jako środowisko modyfikujące kluczowy fragment, przy czym wszystkie wielkości opisujące oddziaływania pomiędzy podsystemami są funkcjonalami gęstości elektronowej (układy są opisywane przez orbitalne Kohna-Shama ortogonalne tylko w obrębie danego podukładu) (Cortona, *Phys. Rev. B*, **44** (1991) 8454, Wesolowski and Warshel *J. Phys. Chem.*, **97** (1993) 8050).

Do symulacji widm elektronowych różnych form syntazy kwasu klawaminowego zastosowano uproszczoną wersję LR-KSCED (Linear Response Kohn-Sham Equations with Constrained Electron Density) z zaniechaną dynamiczną odpowiedzią środowiska (M. Casida and T.A. Wesolowski, *Int. J. Quantum Chem.* **96** (2004) 577-588), znaczenie relaksacji statycznej wydaje się być niewielkie tym niemniej jej wielkość zostanie w przybliżony sposób oszacowana. Podejście to pozwala na bardzo dokładne uwzględnienie wpływu środowiska, a ograniczenie obliczeń TDDFT (Time Dependent Density Functional Theory) do kluczowego fragmentu znacząco poprawia dokładność obliczeń (np. wyeliminowanie błędu spowodowanego blokowaniem diagonalizacją dużych macierzy) oraz skraca znacząco czas potrzebny do uzyskania wyników (zmniejszenie liczby przejść wśród których są poszukiwane wzbudzenia). Obecnie prace skupiają się na optymalnym dobraniu zarówno wielkości centrum aktywnego jak i otoczenia białkowego (w praktyce sprowadza się to do zbudowania jak najmniejszego, ale wciąż wiarygodnego modelu; kryterium jakości będą tutaj zmiany w otrzymanych widmach). Największy model obejmuje w przybliżeniu dwie strefy koordynacyjne żelaza, co odpowiada kuli o promieniu ok. 8-10 Å. Mimo wpisanych w metodę przybliżeń (w szczególności niedokładna wartość nieaddytywnego członu energii kinetycznej, niedoskonałość potencjałów korelacyjno-wymiennych) uzyskana jakość wyników wydaje się być nieosiągalna dla stosowanych w takich przypadkach różnych odmian QM/MM (obydwa podukłady są traktowane w pełni kwantowo).

10. Opracowanie metodyki otrzymywania i określenie właściwości fizykochemicznych syntetycznych związków typu hydrotalkitu zawierających mangan

(dr inż. Roman Dula)

Projekt badawczy 3 T09A 066 27 [2004-2006]

Mangan był wprowadzany w strukturę hydrotalkitów Mg-Al w postaci kationów Mn^{2+} lub Mn^{3+} w warstwę brucytową albo w formie anionów MnO_4^- w obręb przestrzeni międzywarstwowych. Zsyntetyzowano, odpowiednio w drodze współstrącania bądź wymiany anionowej, dwa rodzaje preparatów: formę azotanową $MgMnAlNO_3$ oraz nadmanganianową $MgAlMnO_4$ o podobnych wartościach stosunków atomowych pierwiastków metalicznych Mg/Mn/Al równych 2.0/0.5/1.0. Badania metodą XRD potwierdziły, że otrzymane materiały posiadają strukturę charakterystyczną dla formy azotanowej bądź nadmanganianowej hydrotalkitu, a metodą analizy chemicznej oznaczono wartości stosunków atomowych pierwiastków metalicznych w próbkach bliskie zamierzonym. Otrzymane związki testowano w reakcji utleniania cykloheksenu tlenem molekularnym, prowadzonej w fazie ciekłej w łagodnych warunkach temperatury i ciśnienia. Warunkiem niezbędnym do zajścia reakcji katalitycznej jest, jak wykazano, obecność w środowisku reakcji jonów manganu. Wśród produktów reakcji stwierdzono zarówno tlenek cykloheksanu, będący efektem epoksydacji, jak i związki allilowe - cykloheksenol lub cykloheksenon. Wyższy stopień konwersji osiągnięto stosując hydrotalkity zawierające mangan w postaci anionów, tj. $MgAlMnO_4$. Natomiast w odniesieniu do selektywności do poszczególnych produktów reakcji nie stwierdzono wyraźnej zależności od sposobu wprowadzenia manganu. Obserwowane różnice w aktywności wyjaśniono w oparciu o mechanizm reakcji - rodnikowy mechanizm łańcuchowy, znany pod nazwą autoutleniania.

Analiza rozkładu termicznego preparatów metodą termogravimetrii w powietrzu statycznym pokazała, że próbki dotowane międzywarstwowo anionami nadmanganianowymi były bardziej stabilne termicznie (całkowity rozpad struktury warstwowej występował w nich w temperaturze $426^\circ C$, w porównaniu do $400^\circ C$ dla próbek dotowanych manganem w warstwie), co z kolei prowadziło, jak stwierdzono metodą XRD, do słabszej krystaliczności faz powstających w wyższych temperaturach. Na podstawie porównania wyników analiz metodami XRD i XPS stwierdzono, iż w obu typach materiałów fazy zawierające Mn^{4+} są silnie amorficzne, przy czym powierzchniowa gęstość centrów Mn^{4+} była wyższa dla próbek dotowanych manganem w warstwie, co wpływa na aktywność katalityczną tych materiałów w reakcjach typu całkowitego spalania. Układy typu mieszanych tlenków, otrzymane w drodze kalcynacji prekursorów hydrotalkitowych, były testowane w reakcji całkowitego spalania toluenu. Lepsze właściwości katalityczne uzyskano stosując katalizatory otrzymane przez kalcynację prekursora dotowanego manganem w warstwie. Wyższą aktywność tych materiałów przypisano obecności na ich powierzchni większej, niż w przypadku katalizatora dotowanego manganem międzywarstwowo, ilości łatwo redukowalnych form tlenkowych zawierających Mn^{4+} .

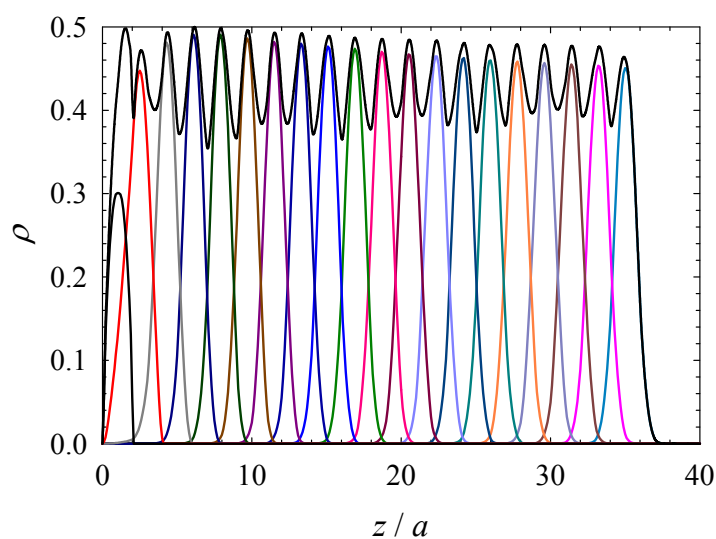
Ponadto zsyntetyzowano, nie opisaną dotąd w literaturze, formę hydrotalkitu dotowanego manganem zarówno w warstwie, jak i międzywarstwowo, oznaczoną jako $MgMnAlMnO_4$, o stosunku $Mg/Mn/Al/Mn = 2/0,5/1/1,4$. Otrzymano także serię preparatów węglanowych, zawierających w warstwie Mg, Ni i Mn i oznaczonych odpowiednio jako: Ni_2MnCO_3 , $NiMgMnCO_3$, $Ni_2MgMnCO_3$ oraz $NiMg_2MnCO_3$. Badania zmierzające do określenia właściwości fizykochemicznych tych preparatów są w toku.

11. Zlokalizowana adsorpcja cząstek koloidalnych w procesach tworzenia pokryć wielowarstwowych metodą "warstwa po warstwie"

(dr Paweł Weroński)

Projekt badawczy 3 T09A 089 27 [2004-2006]

Przeprowadzono symulacje komputerowe adsorpcji wielowarstwowej twardych (nieoddziaływujących) cząstek kulistych zgodnie z wcześniej opracowanym modelem teoretycznym. Symulacje adsorpcji wielowarstw złożonych z dwudziestu monowarstw zostały przeprowadzone dla pokrycia pierwszej warstwy $\theta_1 = 0.01, 0.02, 0.05, 0.10, 0.20$ i 0.30 , przy czym bezwymiarowy czas adsorpcji kolejnych warstw wynosił $\tau=10^4$. W oparciu o dane otrzymane w symulacjach Monte Carlo obliczono dwu- i trójwymiarowe funkcje korelacyjne pozwalające na ilościowy opis struktury wielowarstwy. Przygotowano także oprogramowanie do obliczania rozkładu gęstości wielowarstwy i wyznaczono ten rozkład dla sześciu powyższych wartości pokrycia pierwszej warstwy. Dotychczasowe wyniki wskazują na ścisłą zależność pomiędzy pokryciem pierwszej monowarstwy i profilem gęstości wielowarstwy. Profil ten jest stosunkowo „gładki” w przypadku niskiego pokrycia w pierwszej monowarstwie, natomiast wraz ze wzrostem pokrycia pierwszej warstwy okresowe zmiany gęstości wielowarstwy rosną. Na poniższym wykresie (Rys.1) przedstawiona jest zależność gęstości wielowarstwy ρ w funkcji odległości od powierzchni adsorpcji z/a obliczona dla pokrycia pierwszej warstwy $\theta_1 = 0.30$. Po zaadsorbowaniu wystarczająco dużej liczby monowarstw pokrycie kolejnych warstw ustala się na poziomie bliskim pokryciu maksymalnemu monowarstwy adsorbowanej na powierzchni jednorodnej, a grubość wielowarstwy rośnie liniowo. Wskazuje to na ostateczne ukształtowanie się powierzchniowej (zewnętrznej) struktury wielowarstwy. Liczba monowarstw konieczna do uzyskania ostatecznej struktury powierzchniowej wielowarstwy rośnie gdy pokrycie pierwszej monowarstwy maleje, przy czym w przypadku przeprowadzonych symulacji liczba ta nie przekracza dwudziestu. Oprócz symulacji komputerowych wykonanych w ramach projektu kontynuowano prace nad przygotowaniem modelu teoretycznego adsorpcji wielowarstwowej cząstek miękkich (oddziaływujących).



Rys. 1. Gęstość wielowarstwy ρ w funkcji odległości od powierzchni adsorpcji z/a . Wyniki otrzymane dla pokrycia pierwszej warstwy $\theta_1 = 0.30$ i bezwymiarowego czasu adsorpcji kolejnych warstw $\tau = 10^4$. Czarna linia oznacza całkowitą gęstość wielowarstwy obliczoną jako sumę przyczynków pochodzących od poszczególnych monowarstw (linie kolorowe).

12. Dynamiczne struktury adsorpcyjne – wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na zmiany ruchliwości powierzchni międzyfazowej

(prof. dr hab. Kazimierz Małyśa)

Projekt badawczy 3 T09A 164 27 [2004-2006]

Celem projektu jest określenie mechanizmu i najważniejszych parametrów decydujących o powstaniu dynamicznej warstwy adsorpcyjnej unieruchamiającej powierzchnię wypływającej bańki. Wykonywane badania pozwolą na uzyskanie nowych danych dotyczących: i) mechanizmu powstawania dynamicznej warstwy adsorpcyjnej (jaka jest kinetyka i jak zależy ona od rodzaju SPA), ii) jakie minimalne pokrycie adsorpcyjne jest konieczne do unieruchomienia ciekłej powierzchni międzyfazowej i drastycznego zmniejszenia prędkości bańki, iii) czy wielkość tego minimalnego pokrycia adsorpcyjnego powodującego zahamowanie ruchliwości ciekłej powierzchni międzyfazowej zależy od struktury cząsteczki substancji powierzchniowo aktywnej.

W okresie sprawozdawczym zakupiono zaplanowaną aparaturę i zmodernizowano oraz rozbudowano zestaw aparaturowy i układu rejestracji i cyfrowej obróbki oraz analizy obrazów. Zmodernizowany zestaw pomiarowy umożliwia kontrolowane wytwarzanie pojedynczych baniek oraz monitorowanie i rejestrację ich ruchu na dystansie do 300mm od kapilary z dużą dokładnością. Do rejestracji początkowych przyspieszeń, zmian prędkości lokalnych, rozmiarów i kształtu baniek używano kamery cyfrowej Moticam 2000 współpracującej z oświetleniem stroboskopowym o częstotliwości 100-200Hz. Każdy zarejestrowany obraz był później analizowany za pomocą programu do analizy graficznej Sigma Scan Pro 5.0. Mierzone były zarówno prędkości lokalne jak i deformacje kształtu baniek. Wykonane zostały pomiary prędkości lokalnych i granicznych oraz rozmiarów i deformacji baniek w roztworach n-alkilotrójmetyloamoniowych bromków (C8, C12, C16) oraz w roztworach kwasu n-oktylowego, n-oktanol i n-oktyl- β -D-glukopiranozydu. Dla tych substancji powierzchniowo aktywnych wykonano obliczenia wielkości pokrycia adsorpcyjnego na powierzchni baniek w funkcji stężeń badanych roztworów oraz określono wartości minimalnych pokryć adsorpcyjnych unieruchamiających ciekłą granicę międzyfazową. Stwierdzono, że ruch bańki (jej przyspieszenie i prędkości) są determinowane przez wielkość pokrycia adsorpcyjnego oraz szybkość ustalanie się dynamicznej struktury warstwy adsorpcyjnej (tj. niejednorodnego rozkładu molekuł zaadsorbowanej substancji powierzchniowo aktywnej po powierzchni wypływającej bańki). Wykazano, że początkowe przyspieszenia baniek zmniejszają się wraz ze wzrostem stężenia roztworu (wzrostem stopnia pokrycia powierzchniowego) od wartości 930cm/s^2 w wodzie destylowanej do około 500cm/s^2 w stężonych roztworach. W przypadku niskich pokryć powierzchniowych obserwowane było maksimum na profilach prędkości lokalnych we wszystkich badanych substancjach. Maksimum to nie występowało w przypadku ruchu baniek w wodzie destylowanej i przy dużych stężeniach roztworów. Wykazano, że wielkość maksimum, jego czas zanikania i osiągane później wartości prędkości granicznych zależą od rodzaju substancji powierzchniowo aktywnej (SPA) i wartości pokrycia adsorpcyjnego na powierzchni bańki w momencie jej oderwania od kapilary. Wartości pokrycia adsorpcyjnego niezbędnego do całkowitego unieruchomienia powierzchni wypływającej banki były różne dla różnych SPA i w przypadku badanych bromków n-alkilotrójmetylowych. zmieniały się przedziały od 25 do 1% wraz z wydłużaniem łańcucha węglowodorowego od 8 do 16 atomów węgla.

13. Określenie mechanizmów fizykochemicznych tworzenia wielowarstwowych nanomateriałów ceramicznych o podwyższonej biokompatybilności

(dr inż. Barbara Jachimska)

Projekt badawczy 3 T08D 045 29 [2005-2007]

W ostatnich latach polielektrolity znalazły wiele zastosowań, lecz nasza znajomość ich właściwości, a zwłaszcza konformacji cząsteczki polielektrolitu jest nadal ograniczona. W tej części pracy skupiliśmy się na określeniu konformacji cząsteczki polielektrolitu wyznaczoną na podstawie pomiarów lepkości oraz metody dynamicznego rozpraszania światła (DLS).

Dwa rodzaje polielektrolitów były zastosowane w naszych pomiarach: polyallylamine hydrochloride (PAH), kationowy oraz polysodium 4-styrenesulfonate (PSS) anionowy, oba o masie cząsteczkowej 70.000. Charakterystyka tych polimerów została określona na podstawie pomiarów zeta potencjału, współczynnika dyfuzji oraz pomiarów lepkości w zależności od pH oraz siły jonowej roztworu. Do pomiarów zeta potencjał oraz współczynnik dyfuzji zastosowano aparat Zetasizer Nano ZS firmy Malvern. Pomiarów te zgodne są z wynikami symulacji kształtu oraz konformacji łańcucha polielektrolitu z zastosowaniem dynamiki molekularnej. Symulacje te sugeruje, iż molekuła polielektrolitu w roztworze przyjmuje wydłużony kształt. Zgodnie z tym, współczynnik dyfuzji był interpretowany z zastosowaniem prostego modelu hydrodynamicznego odpowiedniego dla molekuly o wydłużonym kształcie typu „giętkiego pręta”.

Dynamiczna lepkość roztworów polielektrolitów w zależności od ułamka objętościowego polielektrolitu została wyznaczona przy użyciu wiskozymetru kapilarnego. Wyznaczona względna lepkość roztworów polielektrolitów jest większa niż wynika z prawa Einsteina wyprowadzonego dla nie naładowanych cząsteczek kulistych. Pomiarów te pozwalają na wyznaczenie określonej konformacji łańcucha polielektrolitu w roztworze. Wyniki te potwierdziły, iż konformacja molekuly zależy od siły jonowej roztworu. Wyznaczone korelacje są zgodne z symulacjami Monte Carlo przeprowadzonymi przez Stolla, który wykazał że wydłużenie łańcucha wzrasta wraz ze spadkiem siły jonowej roztworu. Otrzymane wyniki potwierdzają, iż informacje uzyskane z metody DLS oraz pomiarów lepkości mogą być używane do określenia właściwości oraz konformacji cząsteczki polielektrolitu w roztworze.

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

(dr inż. Katarzyna Pamin)

Projekt badawczy 3 T09A 092 29 [2005-2009]

Heteropolikwasy charakteryzują się strukturą, która jest dobrze poznana na poziomie molekularnym, a co za tym idzie właściwości kwasowe i redoksove mogą być w łatwy sposób kontrolowane. Przykładem reakcji katalitycznej, która wymaga obu tych funkcji jest utlenianie nasyconych związków organicznych, takich jak lekkie parafiny. Wprowadzenie metalu przejściowego do struktury heteropolikwasów wpływa na ich właściwości utleniające. W zależności od położenia metalu w strukturze heteropolikwasów ich właściwości katalityczne będą się zmieniać.

Pierwszy etap pracy związany jest z wprowadzaniem kationów metali przejściowych w pozycje kationowe struktur heteropolikwasów. Do kwasów $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ i $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ wprowadzone zostały kationy kobaltu. W wyniku syntezy otrzymane zostały następujące katalizatory: $\text{Co}_3(\text{PW}_{12}\text{O}_{40})_2$, $\text{HCoPW}_{12}\text{O}_{40}$, $\text{H}_2\text{Co}_{0,5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$, $\text{Co}_3(\text{PMo}_{12}\text{O}_{40})_2$, $\text{HCoPMo}_{12}\text{O}_{40}$, $\text{H}_2\text{Co}_{0,5}\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$. Badane katalizatory zostały scharakteryzowane za pomocą analizy termicznej i rentgenograficznej. Zmiany w rentgenogramach i derywatogramach badanych katalizatorów potwierdzają otrzymanie soli o zmieniającej się zawartości kobaltu w próbkach. Celem badań katalitycznych było określenie wpływu atomów kobaltu w pozycji kationowej w strukturze heteropolizwiązków na ich właściwości redoksove i kwasowo-zasadowe w reakcji utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym. Równocześnie właściwości kwasowe tych preparatów zostały określone w reakcji odwodnienia etanolu. Dla porównania zmierzono również aktywności katalityczne kwasów fosfowolframowego i fosfomolibdenowego w obu reakcjach. Reakcja utleniania była prowadzona w temperaturze 120°C przez 6 godzin pod ciśnieniem 10 atm.. Produktami tej reakcji był cyklooktanol i cyklooktanon. Reakcja odwodnienia etanolu była prowadzona w przepływowym układzie katalitycznym, w strumieniu helu o przepływie 30 mL/min. Aktywności katalityczne preparatów porównywano w temperaturze 225°C . Podstawienie protonów atomami kobaltu powoduje stopniowe osłabienie mocy kwasowej syntezowanych soli. Sole obojętne, w których wszystkie protony zostały podstawione metalem, wykazują najniższą aktywność w reakcji odwodnienia etanolu. Wprowadzenie kobaltu do struktury kwasu $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ ma znaczący wpływ na aktywność katalityczną w reakcji utleniania cyklooktanu. Natomiast obecność kobaltu w strukturze kwasu $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ tylko w niewielkim stopniu poprawia aktywność katalityczną.

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

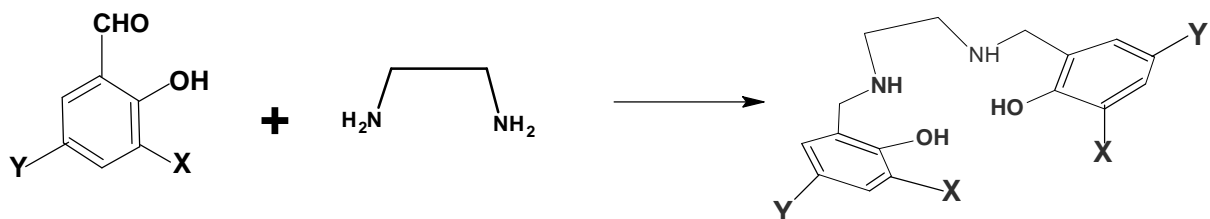
(dr Jan Poltowicz)

Projekt badawczy 3 T09B 091 29 [2005-2009]

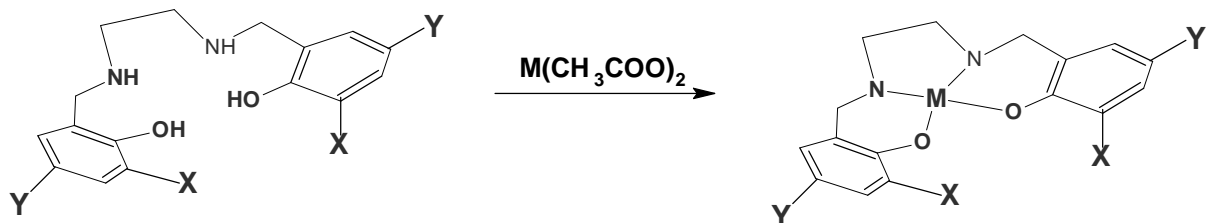
Właściwości katalityczne kompleksów makrocyclicznych budzą coraz większe zainteresowanie. Trzy grupy związków: metaloporfiryny, metaloftalocyjaniny i metalosaleny są przedmiotem rozlicznych badań jako potencjalnych selektywnych katalizatorów. Dużo informacji istnieje na temat reaktywności tych kompleksów, szczególnie kompleksów z podstawnikami ściągającymi elektrony z pierścienia. Natomiast w przeciwieństwie do tego mamy bardzo mało informacji na temat właściwości katalitycznych kompleksów z podstawnikami donującymi elektrony do pierścienia.

W pracy tej przedstawiamy nasze badania na temat syntezy i katalitycznych właściwości kompleksów salenowych z podstawnikami donującymi elektrony do pierścienia.

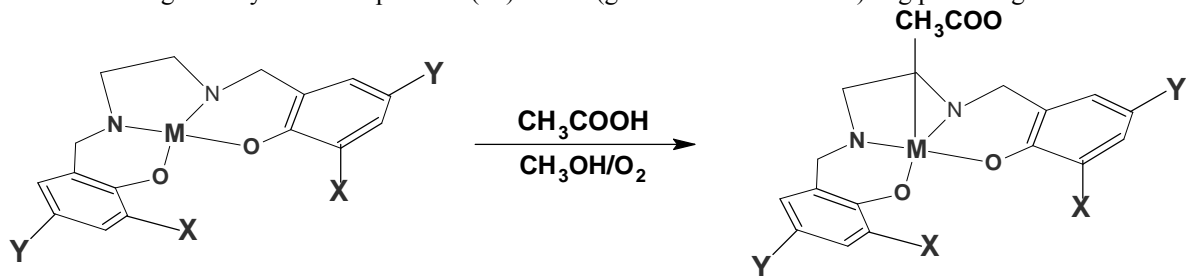
Ligand salenowy otrzymano przez klasyczną syntezę w reakcji odpowiedniego aldehydu alkilosalicylowego z 1,2-dwuaminocycloheksanem w 96% etanolu:



Kompleks Co(II)salenowy zsyntezowano z ligandu salenowego i octanu kobaltu(II) w roztworze dwuchlorometan/metanol:



Następnie otrzymany salenowy kompleks kobaltu Co(II)salen poddano utlenianiu powietrzem w obecności kwasu octowego i otrzymano kompleks Co(III)salenX (gdzie X = acetate anion). wg poniższego schematu:



Otrzymano cztery ligandy salenowe: salen(OCH₃)₂, salen(OC₂H₅)₂, salen(t-Bu)₄ oraz prosty salen. Metalacja tych ligandów z octanem kobaltu daje osiem kompleksów: Co(II)(salen), Co(III)(salen)OAc, Co(II)(salen)(OC₂H₅)₂, Co(III)(salen)(OC₂H₅)₂OAc, Co(II)(salen)(OCH₃)₂, Co(III)(salen)(OCH₃)₂OAc, Co(II)(salen)(t-Bu)₄ i Co(III)(salen)(t-Bu)₄OAc. Wszystkie ligandy i metalosalenowe kompleksy badano metodami spektroskopii UV-Vis, EPR, FTIR i za pomocą woltametrii cyklicznej.

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

(doc. dr hab. Mirosław Derewiński)

Projekt badawczy 3 T09A 029 29 [2005-2008]

Celem projektu, rozpoczętego w październiku 2005, jest określenie i optymalizacja warunków syntezy membran z zeolitów o różnej architekturze i wielkości kanałów tj. FAU, MFI oraz BEA. Opracowane zostaną metody preparatyki stabilnych, monodispersyjnych zawiesin koloidalnych nanokryształów zeolitów w/w typów, które po naniesieniu w postaci monowarstwy na powierzchnie porowatego nośnika będą prekursorem syntezowanych w warunkach hydrotermalnych cienkich warstw zeolitowych. Określony zostanie wpływ różnorodnych parametrów syntezy (metoda preparatyki, temperatura i czas syntezy, skład żelu i jego starzenie) na strukturę i jakość otrzymanych cienkich warstw zeolitowych. Określona zostanie przepuszczalność otrzymanych membran względem wybranych gazów, a ich użyteczność zostanie sprawdzona w procesach rozdziału mieszanin lekkich węglowodorów.

PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE

1. Nowe materiały katalityczne: kompozyty minerałów warstwowych i heteropolizwiązków

(prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska, mgr inż. Aleksandra Pacuła)

Projekt badawczy promotorski 4 T08D 051 24 [2003-2005]

W ostatnim roku realizacji grantu promotorskiego zsyntezowano i poddano interkalacji heteropolianionami dwie serie hydrotalkitów: magnezowo-glinową i cynkowo-glinową. Zakres wartości stopnia podstawienia $x=M^{3+}/M^{2+}+M^{3+}$, przy których uzyskano rentgenograficznie czystą fazę hydrotalkitu jest znacznie większy dla układów z magnezem ($0.169 \leq x \leq 0.357$) niż dla układów z cynkiem ($0.323 \leq x \leq 0.345$). W układach magnezowo-glinowych stopień krystaliczności preparatów rośnie wraz ze wzrostem stosunku Mg/Al, natomiast w układach cynkowo-glinowych wzrost stosunku Zn/Al powoduje pogorszenie krystaliczności. Jako źródło anionów do reakcji interkalacji analogów hydrotalkitu wybrano heteropolikwas $H_4SiMo_{12}O_{40}$. Kryterium wyboru stanowiły jego słabsze niż w przypadku innych badanych heteropolikwasów właściwości kwasowe, dzięki czemu zminimalizowany został efekt destrukcji struktury hydrotalkitu w środowisku reakcji. Eksperymenty przeprowadzono zarówno z anionem $SiMo_{12}O_{40}^{4-}$, jak i jego formą zredukowaną elektrochemicznie dwoma elektronami, tj. heteropolianionem $SiMo_{12}O_{40}^{6-}$.

Czynnikami decydującymi o skuteczności procesu interkalacji analogów hydrotalkitu są przede wszystkim: ładunek heteropolianionu, stopień krystaliczności nośnika i rodzaj metalu dwuwartościowego. W przypadku niezredukowanego anionu $SiMo_{12}O_{40}^{4-}$ jedynie w przypadku słabo krystalicznych matryc cynkowo-glinowych obserwuje się powstanie fazy o odległości międzywarstwowej odpowiadającej anionowi Keggina. Wykazano, że elektrochemiczna redukcja jest dobrym sposobem na zaadaptowanie ładunku heteropolianionu do potrzeb procesu interkalacji. Interkalacja przy zastosowaniu zredukowanego anionu $SiMo_{12}O_{40}^{6-}$ jest szybka i skuteczna w przypadku większości użytych hydrotalkitów magnezowo-glinowych i wszystkich cynkowo-glinowych, a interkalowane hydrotalkity wykazują odległość międzywarstwową spodziewaną dla anionów o rozmiarach jednostki Keggina. Fazy pożądanej towarzyszą zawsze mniejsze lub większe ilości faz obcych, identyfikowanych jako faza hydrotalkitowa interkalowana produktami depolimeryzacji heteropolianionów, heteropolisól metali wymytych z warstwy brucytowej w trakcie traktowania roztworem heteropolikwasu, lub niewymieniona faza wyjściowa. W odróżnieniu od interkalowanych magnezowo-glinowych analogów hydrotalkitu, wymiana anionowa w próbkach cynkowo-glinowych jest niekompletna. Stabilność termiczna interkalowanych anionów $SiMo_{12}O_{40}^{6-}$ jest podobna jak w kwasie litym.

Chemiczna natura matrycy hydrotalkitowej determinuje właściwości kwasowe i zasadowe/redoksose produktów interkalacji, określone w testowej reakcji rozkładu izopropanolu. Obie matryce obniżają drastycznie kwasowość układu w porównaniu z czystym heteropolikwasem $H_6SiMo_{12}O_{40}$, przy czym efekt jest większy dla heteropolianionu wbudowanego w bardziej zasadowy hydrotalkit magnezowo-glinowy. Katalizator ten charakteryzuje się także szczególnie wyeksponowanymi właściwościami zasadowymi/redoksoowymi. Oba badane katalizatory wykazują znaczną aktywność w reakcji utleniania cyklooktanu.

2. Struktura i morfologia powierzchni a adsorpcja CO na Au/Fe₃O₄(001)

(prof. dr hab. Józef Korecki, mgr Jakub Barbasz)

Projektr badawczy promotorski 4 T08A 004 25 [2003-2006]

Na podstawie pomiarów TPD, wiadomo, że dla klasterów złota o rozmiarach nanometrowych adsorpcja CO nie zależy od stosowanego nośnika tlenkowego. W literaturze znane są między innymi widma TPD dla klasterów Au o rozmiarach rzędu kilku nanometrów na powierzchni magnetytu o orientacji (111). Niniejsza praca ma na celu zbadanie wpływu terminacji powierzchni nośnika.

Kontynuowano prace konstrukcyjne zmierzające do poprawy czułości układu do termoprogramowanej desorpcji (TPD) pracującego w warunkach ultra wysokiej próżni. Poprawę stosunku sygnału z próbki do sygnału tła uzyskano przez zastosowanie pompowania różnicowego.

W celu określenia czułości i przydatności skonstruowanego układu do pomiarów TPD modelowych katalizatorów na monokrystalicznych nośnikach przeprowadzono testowe pomiary desorpcji metali z powierzchni wycinalnej W(540), nachylonej do powierzchni W(110) pod kątem 6.3°. Obrazy STM uzyskane dla tej powierzchni wskazują, że monowarstwa Fe nie rośnie na niej w sposób pseudomorficzny, jak to ma miejsce dla powierzchni W(110). W celu sprawdzenia termodynamicznej stabilności tego po raz pierwszy badanego układu, przeprowadzono desorpcję żelaza z warstw o grubości od ułamka do kilku warstw atomowych (AL). W krzywej TPD zaobserwowano dwa wyraźne piki: niskotemperaturowy (przy ok. 1000 K) dla niskich pokryć oraz wysokotemperaturowy dla grubszych warstw. Jest to wynik odwrotny do sytuacji, z jaką mamy do czynienia dla Fe/W(110), gdzie pseudomorficzna monowarstwa wykazuje stabilność do temperatur znacznie przekraczających temperaturę desorpcji grubszych warstw. Fakt ten świadczy o silnej modyfikacji oddziaływania adsorbat-podłoże w wyniku obecności stopni o dużej gęstości.

Testowe pomiary TPD zostały też przeprowadzone dla układów Au/W(540) oraz Co/Au/W(540), wykazując oczekiwaną czułość i selektywność metody.

Wykonano pierwsze pomiary adsorpcji/desorpcji CO z powierzchni Au/Fe₃O₄(001) dla klasterów złota o średnicy ok. 3 nm. Dla adsorpcji prowadzonej przy temperaturze 170 K nie zaobserwowano piku desorpcji dla nanometrowych cząstek Au na powierzchni magnetytu o terminacji tetraedrycznej.

Prowadzona jest optymalizacja nośnika próbki tak aby adsorpcje można było prowadzić w niższej temperaturze, tj. ok. 100 K. Przeprowadzone będą pomiary porównawcze dla powierzchni magnetytu o różnych terminacjach.

Równocześnie dokonano szczegółowej analizy wyników badań STM struktury nośnika tlenkowego oraz adsorpcji Au. Odpowiednie rozdziały pracy doktorskiej są w trakcie końcowej redakcji.

3. Utleniające odwodornienie izobutanu na domieszkowanych układach tlenków chromu i wanadu na nośnikach tlenkowych

(prof.dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr inż. Katarzyna Samson)

Projekt badawczy promotorski 4 T09B 115 25 [2003-2006]

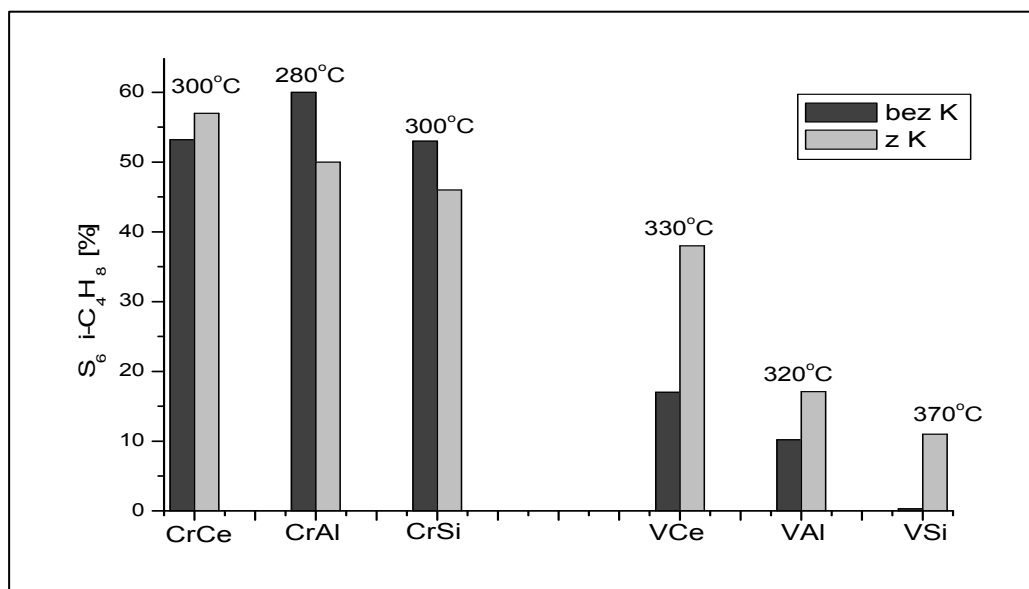
W roku 2005 kontynuowano badania związane z wykonywaniem pracy doktorskiej o powyższym tytule. Zakres prac obejmował:

- preparatykę (metodą impregnacji) dwóch serii katalizatorów zawierających aktywne fazy CrO_x i VO_x (1-1.5 teoretycznej monowarstwy = 10 at Cr lub V/nm² nośnika) zdyspergowane na komercyjnych nośnikach: CeO_2 (Fluka), Al_2O_3 (Merck) i SiO_2 (Aerosil); zsyntetyzowano również analogiczne układy z domieszką potasu (K/Cr lub V = 0.1). Symbole katalizatorów: CrS, VS, CrSK, VSK, gdzie S jest kationem nośnika.
- charakterystykę fizykochemiczną w/w katalizatorów: pomiary powierzchni właściwej metodą BET, analizę składu powierzchni metodą XPS, pomiary właściwości kwasowo-zasadowych reakcją sondą rozkładu izopropanolu, pomiary redukowalności metodą TPR H_2 (wybranych preparatów) oraz pomiary spektroskopii Ramana
- przeprowadzenie testów katalitycznych w/w preparatów w reakcji UOW izobutanu w zakresie temperatur 280-450°C.

Powyższe badania wykazały, że:

- tlenek chromu zdyspergowany na nośnikach CeO_2 , Al_2O_3 i SiO_2 jest bardziej aktywny i selektywny do izobutenu w reakcji UOW izobutanu niż tlenek wanadu naniesiony na analogiczne nośniki; najlepszy w tej grupie katalizator CrAl osiągał 60% selektywności do iC_4H_8 , przy konwersji iC_4H_{10} ~6%, w temperaturze reakcji 280°C
- potas zdecydowanie obniża aktywność właściwą w badanej reakcji dla wszystkich preparatów CrS i VS za wyjątkiem CrAlK i VAlK.
- wpływ potasu na selektywność do izobutenu zależy od rodzaju fazy aktywnej: dla VO_x obserwowano wzrost selektywności; dla CrO_x stwierdzono obniżenie selektywności do izobutenu lub brak wpływu.

Na Rys.1 przedstawiono porównanie wpływu potasu na aktywność katalityczną (temperatura 6% konwersji iC_4H_{10} , T_6 umieszczona nad słupkami) i selektywności do izobutenu dla obu serii katalizatorów CrO_x i VO_x /nośnik tlenkowy.



Wyniki katalityczne są obecnie korelowane z rezultatami badań fizykochemicznych.

4. Wpływ domieszek do układów VO_x/nośnik tlenkowy na ich właściwości fizykochemiczne i katalityczne w reakcjach utleniającego odwodornienia niższych alkanów

(prof.dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr inż. Anna Klisińska)
Projekt badawczy promotorski 4 T09B 108 25 [2003-2005]

Projekt zakończono obroną (z wyróżnieniem) rozprawy doktorskiej w języku angielskim p.t. "Effect of Additives to VO_x/Oxide Support Catalysts on Their Physicochemical and Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Lower Alkanes".

Celem pracy było zbadanie wpływu domieszek metali przejściowych o różnej elektroujemności (Ni²⁺, Cr³⁺, Nb⁵⁺, Mo⁶⁺), oraz metali alkalicznych do katalizatorów na osnowie V₂O₅, zdyspergowanym na nośniku o charakterze zasadowym MgO i kwaśnym SiO₂, na strukturę, właściwości fizykochemiczne i działanie katalityczne w reakcji utleniającego odwodornienia, (UOW) etanu i propanu, oraz poszukiwanie korelacji pomiędzy właściwościami fizykochemicznymi katalizatorów (kwasowo-zasadowymi i redoksowymi) a ich działaniem katalitycznym.

Główne wnioski pracy:

1. Domieszki wprowadzone do układów VO_x/SiO₂ i VO_x/MgO wpływają na aktywność katalityczną i selektywność do olefin w reakcji utleniającego odwodornienia (UOW) niższych alkanów oraz na właściwości kwasowo-zasadowe i redukowalność: kierunek i wielkość efektu zależą od właściwości katalizatora i natury alkanu.
2. Dla układów VO_x/SiO₂, dla których: *fazą aktywną jest zdyspergowany V₂O₅, *stwierdzono obecność centrów kwasowych Lewisa i Brönsteda, *właściwości kwasowe dominują nad zasadowymi, stwierdzono:
 - a. jony metali przejściowych podwyższają aktywność właściwą obu reakcji UOW etanu i propanu; obecność K i innych jonów metali alkalicznych oraz ziem alkalicznych obniżają aktywność: aktywność w obu reakcjach wzrasta z liczbą centrów kwasowych,
 - b. selektywność w UOW propanu wzrasta: z obniżeniem kwasowości: ilości centrów Lewisa i Brönsteda i ze zwiększeniem zasadowości (gęstości elektronów) centrum V-O, oraz ze wzrostem energii wiązania M-O,
 - c. domieszki nie mają znaczącego wpływu na selektywność do etenu w reakcji UOW etanu, selektywność nie zależy od właściwości kwasowych (cząsteczka etenu bardziej elektrofilowa niż propenu)
3. Dla układów VO_x/MgO dla których: *fazą aktywną jest ortowanadan magnezu Mg₃V₂O₈, stwierdzono obecność centrów kwasowych Lewisa, *właściwości zasadowe dominują nad kwasowymi:
 - a. wszystkie domieszki obniżają aktywność właściwą w reakcji UOW propanu, oraz za wyjątkiem Cr i Nb, w reakcji UOW etanu: dla obu reakcji nie stwierdzono zależności pomiędzy aktywnością właściwą katalizatorów a ich właściwościami kwasowo-zasadowymi,
 - b. dodatek K obniża selektywność do propenu, natomiast jony metali przejściowych podwyższają selektywność w obu reakcjach: *brak wyraźnych zależności pomiędzy selektywnością a właściwościami kwasowo-zasadowymi, *selektywność do propenu wzrasta z obniżeniem redukowalności układów.
4. Przeciwny wpływ K na selektywność do propenu obserwowany dla VSiK (wzrost) i VMgK (spadek), przy obniżeniu kwasowości obu układów, sugeruje, że odmienne właściwości obu układów kontrolują selektywność: *właściwości kwasowo-zasadowe w przypadku VSiK, *właściwości tlenu katalizatora obejmujące redukowalność oraz prawdopodobnie formy tlenu (bardziej elektrofilowe) w przypadku VMgK.

5. Nieodwracalna adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych

(prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk, mgr inż. Katarzyna Jaszczólt)

Projekt badawczy promotorski 4 T09A 034 26 [2004-2006]

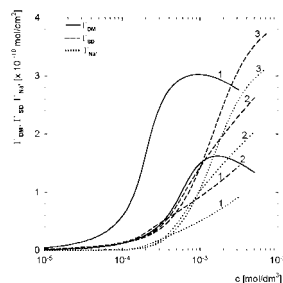
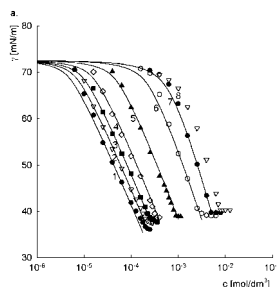
Przeprowadzono teoretyczne i eksperymentalne badania kinetyki adsorpcji na powierzchniach heterogenicznych i struktury tworzonych klasterów. Wyniki teoretyczne uzyskano na drodze symulacji metodą Monte-Carlo wykorzystując algorytm randomalnej sekwencyjnej adsorpcji (RSA). W symulacjach tych wyznaczono funkcję dostępnej powierzchni, kinetykę adsorpcji oraz pokrycie maksymalne cząstek adsorbujących się nieodwracalnie na centrach adsorpcji w zależności od parametru λ , będącego stosunkiem wielkości cząstek do wielkości centrum. Wykazano, że przez odpowiedni dobór tego parametru można uzyskać żądany stopień koordynacji centrum adsorpcji. Strukturę klasterów generowanych w tych symulacjach określano ilościowo przy pomocy dwucząsteczkowej funkcji korelacyjnej. Wyniki teoretyczne były weryfikowane w pomiarach doświadczalnych prowadzonych dla modelowych suspensji koloidalnych-lateksów polistyrenowych. Syntezę monodispersyjnych lateksów prowadzono na drodze polimeryzacji emulsyjnej styrenu bez dodatku surfaktantów. Rozmiary cząstek koloidalnych oraz ich ładunek powierzchniowy był regulowany przez zmianę siły jonowej roztworu oraz zmianę inicjatora reakcji. Liczbowe stężenie cząstek określano przy pomocy licznika Coultera, rozmiar cząstek przy pomocy metody PCS (photon correlation spectroscopy), a ich ruchliwość elektroforetyczną (potencjał zeta) metodą mikroelektroforezy impulsowej przy pomocy urządzenia Zetasizer Nano ZS, firmy Malvern. Średni rozmiar cząstek suspensji ujemnie naładowanego lateksu wynosił $a_p=0.9 \mu\text{m}$ (odchylenie standardowe $0.09 \mu\text{m}$) natomiast cząstki dodatnio naładowanego lateksu posiadały rozmiar $a_s= 0,45 \mu\text{m}$ (odchylenie standardowe $0.04 \mu\text{m}$). Otrzymane i scharakteryzowane suspensje lateksowe zostały użyte do bezpośrednich pomiarów adsorpcji cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych (mika pokryta dodatnio naładowanymi cząstkami lateksu). Pomiary prowadzono w nowym naczynku dyfuzyjnym, umożliwiającym wyznaczenie w warunkach *in situ* zarówno kinetyki, jak również struktury tworzonych warstewek adsorpcyjnych oraz maksymalnych pokryć. Główną zaletą tego naczynka jest duża równomierność transportu cząstek na obszarach rzędu centymetrów kwadratowych. Zwiększa to w sposób znaczący precyzję pomiaru ze względu na możliwość analizy statystycznej dużych populacji cząstek koloidalnych. Wykazano, w zgodzie z przewidywaniami teoretycznymi, że przy pomocy zastosowanej metodyki możliwe jest wytwarzanie klasterów powierzchniowych o ściśle zdefiniowanym stopniu koordynacji i składzie. Zasugerowano również, że te wyniki uzyskane dla modelowych układów koloidalnych mogą być wykorzystane jako wyniki referencyjne dla procesów adsorpcji multiwarstwowej adsorpcji polielektrolitów, nie dającej się określić w sposób bezpośredni.

6. Adsorpcja mieszanin jonowych i niejonowych związków powierzchniowo-czynnych na granicach faz ciecz/gaz

(doc.dr hab. Piotr Warszyński, mgr Ewelina Jarek)

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 061 26 [2004-2005]

W ramach powyższego projektu zaadoptowano model mieszanin jonowych i niejonowych związków powierzchniowo czynnych do opisu układu będącego mieszaniną cukrowych pochodnych: n-dodecylo- β -D-glukozy i n-dodecylo- β -D-maltozy typowych, niejonowych związków z jonowymi związkami powierzchniowo czynnymi takimi jak siarczan dodecyłu sodu (SDS) i bromek cetylotrimetyloamoniowy (CTABr). Cukrowe pochodne są stosunkowo od niedawna wykorzystywane jako surfaktanty. Ich duży potencjał aplikacyjny wynika z ich niskiej toksyczności, łatwości z jaką ulegają biodegradacji oraz zdolności do efektywnego obniżania napięcia powierzchniowego. Aktywność powierzchniowa mieszanin takich związków z surfaktantami jonowymi silnie zależy od składu takiej mieszaniny. Przez zastosowanie jednego zestawu parametrów modelu mieszanin jonowych i niejonowych surfaktantów wyznaczone zostały napięcia powierzchniowe mieszanin o różnym składzie. Wartości parametrów modelu zostały uzyskane w wyniku dopasowania do danych eksperymentalnych dla czystych związków. Obliczone na tej podstawie teoretyczne izotermy napięcia powierzchniowego dla roztworów o mieszanym składzie bardzo dobrze zgadzają się z danymi eksperymentalnymi rys.1. wynikiem rozwiązania układu równań wyprowadzonych na podstawie warunku równości potencjału chemicznego na powierzchni i w objętości są bezpośrednio wartości nadmiarowych stężeń powierzchniowych dla poszczególnych składników układu to znaczy, dla jonu surfaktantu, przeciwjonu oraz obojętnej pochodnej cukrowej rys.2. Ponadto, parametry modelu mogą być korelowane z molekularnymi właściwościami składników obecnych w roztworze, takimi jak rozmiar hydrofilowej części cząsteczki, polaryzowalność przeciwjonów czy budowa molekularna całej cząsteczki. Model uwzględnia także, właściwości elektryczne układu surfaktantów. Te cechy pozwalają stwierdzić że, zastosowanie danego modelu pozwala na głębszy wgląd w mechanizm zjawisk adsorpcji na ciekłych granicach faz w porównaniu z istniejącymi w literaturze modelami opartymi na równaniu Gibbsa-Duhema (przykładem może być teoria Motomury), które nie pozwalają na bezpośrednie oszacowanie składu warstw adsorpcyjnych, opierając się na dopasowaniu wielomianu do poszczególnych izoterm, co nie daje możliwości przypisania współczynnikom takiego wielomianu jakiegokolwiek znaczenia fizycznego.



Rys.1. Napięcie powierzchniowe mieszanin n-dodecylo- β -D-maltozy (DM) i siarczanu dodecyłu sodu (SDS) o różnym składzie w funkcji całkowitego stężenia surfaktantów w roztworze: 1- $X_{DM}=1$, 2- $X_{DM}=0.7$, 3- $X_{DM}=0.5$, 4- $X_{DM}=0.3$, 5- $X_{DM}=0.1$, 6- $X_{DM}=0.02$, 7- $X_{DM}=0.005$, 8- $X_{DM}=0$, gdzie X_{DM} – ułamek molowy DM

Rys.2. Nadmiarowe stężenia powierzchniowe w funkcji całkowitego stężenia surfaktantów w roztworze: 1- $X_{DM}=0.02$, 2 - $X_{DM}=0.005$, 3 - $X_{DM}=0$, linia ciągła – dla niejonowego surfaktantu (DM), linia przerywana – dla jonu surfaktantu (SD⁺), linia kropkowana – dla przeciwjonu (NA⁺)

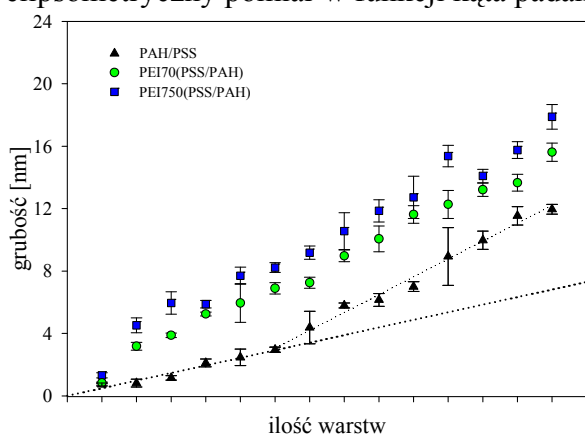
7. Właściwości powierzchniowe i elektryczne multiwarstw polielektrolitów osadzanych na makroskopowych powierzchniach

(doc. dr hab. Piotr Warszyński, mgr Marta Kolasińska)

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 085 27 [2004-2006]

Celem badań było określenie wpływu rodzaju pierwszej, zakotwiczonej warstwy na strukturę całego filmu polielektrolitowego. Badane multiwarstwy polielektrolitów (PEM) wytwarzano metodą sekwencyjnej adsorpcji przeciwnie naładowanych polijonów na powierzchniach wafla krzemowego. Do badań użyto modelowego układu polielektrolitów PAH/PSS oraz analogicznego – osadzonego na pierwszej warstwie PEI. Zbadano również wpływ masy cząsteczkowej PEI na grubość otrzymanych struktur.

Zbadano grubości danych multiwarstw, skupiając się na zmianach spowodowanych wprowadzeniem warstwy PEI. Pomiary zostały wykonane przy użyciu elipsometru obrazującego EP³, Nanofilm, pracującego przy jednej długości fali, w trybie auto-nulling, w konfiguracji PCSA (akronim PCSA odpowiada sekwencji elementów optycznych elipsometru: polaryzator-kompensator-próbka-analizator). Współczynnik załamania światła dla PEM (niezbędny do wyznaczenia grubości tych struktur) został określony poprzez elipsometryczny pomiar w funkcji kąta padania i jego wartość wyniosła 1.55.



Rys. 1. Grubości multiwarstw w funkcji ilości warstw polielektrolitów

Na Rysunku 1 przedstawiono zależność grubości filmów od ilości warstw. Filmy z warstwą PEI są grubsze, niż mające tę samą liczbę warstw, ale składające się wyłącznie z PAH/PSS. Dla struktur PAH/PSS przyrost grubości z ilością warstw (nachylenie regresji liniowej na wykresie) jest mniejszy dla pierwszych sześciu warstw PE niż dla kolejnych (0.5 nm/- i 1.1 nm/warstwę). Zarówno PAH, jak i PSS są liniowymi polielektrolitami. PAH zaadsorbowany na stałej powierzchni Si-SiO₂ przyjmuje płaską konformację, tworząc niejednorodną warstwę o niewielkim stopniu pokrycia. Druga warstwa (PSS) powstaje na zaadsorbowanym PAH. Kiedy PAH osadza się ponownie podczas tworzenia trzeciej warstwy, niepokryte obszary krzemu zaczynają się wypełniać, co w konsekwencji prowadzi do wysokiego stopnia interpenetracji między warstwami. Wraz ze wzrostem liczby warstw powierzchnia filmu staje się bardziej jednorodna. W przypadku struktur PEI/(PSS/PAH) już od pierwszej warstwy obserwuje się równomierny przyrost dochodzący do ok. 1.1 nm/warstwę – podobnie, jak dla filmów (PAH/PSS) grubszych niż 6 warstw. Stwierdzono niewielki wpływ masy cząsteczkowej PEI na grubość otrzymanych struktur - filmy zawierające warstwę PEI o ciężarze cząsteczkowym 750 kDa były o 1-2 nm grubsze od tych, zawierających PEI o masie cząsteczkowej 70 kDa PEI, ale przyrost grubości na warstwę jest identyczny w obu przypadkach (ok. 1.1 nm/warstwę). Usieciowana PEI użyta jako pierwsza, zakotwiczonej warstwa, spełnia rolę szkieletu dla tworzących się kolejnych warstw, dzięki czemu obserwuje się równomierny przyrost grubości, a powstałe struktury są bardziej jednorodne, co zostało potwierdzone badaniami (np. kątów zwilżania).

Tryb obrazowania elipsometrycznego pozwolił uzyskać profile grubości badanych struktur oraz wartości szorstkości ich powierzchni. Filmy mające, jako ostatnią, warstwę polikationową są bardziej szorstkie od tych, które zakończone są warstwą polianionową.

8. Wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe

(prof. dr hab. Kazimierz Małysa, mgr Marta Krasowska)

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 092 27 [2004-2006]

Celem projektu jest wyjaśnienie roli substancji powierzchniowo aktywnych i mechanizmu ich działania w powstawaniu kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe przy zderzeniu bańki z powierzchniami ciała stałego. Bańka przybywająca na powierzchnię roztworu tworzy symetryczny (gaz/ciecz/gaz) film pianowy, podczas gdy na powierzchni ciecz/ciało stałe tworzy się niesymetryczny (gaz/ciecz/ciało stałe) film zwilżający. Właściwości takiego filmu (stabilność) zależą głównie od właściwości powierzchni ciała stałego i obecności substancji powierzchniowo aktywnych oraz ich rodzaju i stężenia, a także siły jonowej i pH roztworu. Jest dobrze znanym fakt, że aby nastąpiło utworzenie kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe powierzchnia ciała stałego powinna wykazywać właściwości hydrofobowe, ponieważ film zwilżający powierzchnie hydrofobową jest niestabilny i łatwo ulega przerwaniu.

W okresie sprawozdawczym zakupiono zaplanowaną aparaturę i zmodernizowano zestaw aparaturowy i układ cyfrowej obróbki oraz analizy obrazów. Wykonano pomiary prędkości lokalnych i pulsacji kształtu baniek w trakcie kolizji z powierzchniami ciał stałych w roztworach n-pentanolu, n-heksanolu i n-oktanolu. Zbadano wpływ stężenia badanych substancji powierzchniowo aktywnych oraz stopnia ich pokrycia adsorpcyjnego na powierzchni bańki na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe. W wodzie destylowanej bańka zderzająca się z hydrofilową powierzchnią ciała stałego odbija się kilkakrotnie i można zaobserwować 4 - 5 wyraźnych cykli „zderzenie-odbicie”. Równocześnie kształt odbijającej się bańki zmienia się gwałtownie w czasach krótszych od 0.85 ms. Z każdym cyklem „zderzenie-odbicie” prędkość bańki ulega zmniejszeniu wskutek dyssypacji energii. Jednakże w przypadku powierzchni hydrofilowej (płytki szklanej) nawet po zatrzymaniu bańki nie zostaje utworzony kontakt trójfazowy ponieważ film ciekły (zwilżający) jest stabilny i nie ulega przerwaniu. Na powierzchni hydrofobowej film ciekły (zwilżający) jest niestabilny i powszechnie przyjmuje się, że każda kolizja bańki powinna prowadzić do utworzenia kontaktu trójfazowego i przyczepienia bańki. Zaobserwowano jednakże, że nawet przy tak hydrofobowym ciele stałym jak Teflon, przyczepienie bańki nie następuje podczas pierwszej kolizji jeżeli powierzchnia jest gładka i wystąpić może (podobnie jak w przypadku powierzchni hydrofilowej) kilka cykli „zderzenie-odbicie”. Jednakże po zatrzymaniu bańki zawsze następowało utworzenie kontaktu trójfazowego i przyczepienie bańki do powierzchni Teflonu, a czas powstania kontaktu trójfazowego (najdłuższy) wynosił 84 ms. W roztworach badanych substancji powierzchniowo aktywnych (SPA) obserwowaliśmy przyspieszenie szybkości tworzenia kontaktu trójfazowego. W roztworach SPA prędkości baniek ulegają znacznemu zmniejszeniu wskutek zahamowania ruchliwości ich powierzchni międzyfazowej gaz/ciecz poprzez zaadsorbowane cząsteczki SPA (gradienty napięcia powierzchniowego). Kiedy bańka dochodzi do granicy faz ciecz/ciało stałe z mniejszą prędkością wtedy czas kontaktu pomiędzy bańką a ciałem stałym ulega wydłużeniu. Im dłuższy czas kontaktu tym większe prawdopodobieństwo utworzenia kontaktu trójfazowego. Według naszych badań już pokrycia adsorpcyjne na bańce równe 0.4% obniżały prędkość lokalną bańki, a pokrycia adsorpcyjne rzędu kilku procent zmniejszały prędkość o ponad 50%. Obecność SPA może także modyfikować właściwości filmu ciekłego oddzielającego zderzającą się bańkę od powierzchni ciała stałego.

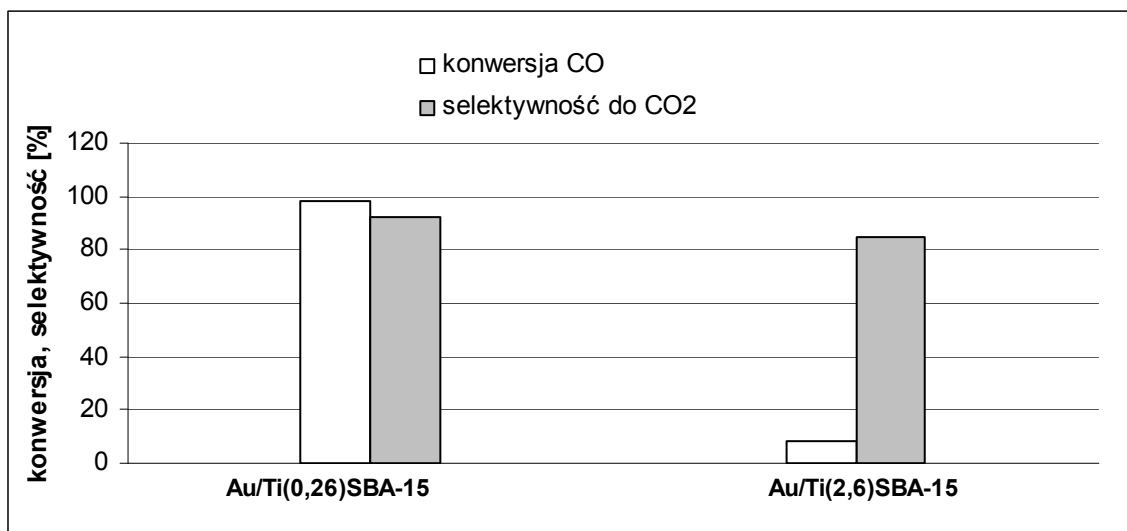
9. Nanocząstki Au na nośnikach tlenkowych jako katalizatory utleniania CO i węglowodorów

(prof. dr hab. Barbara Grzybowska-Świerkosz, mgr inż. Małgorzata Ruszel)
Projekt badawczy promotorski 4 T09B 066 27 2004-2007]

Celem niniejszego projektu jest zbadanie wpływu rodzaju nośnika na właściwości katalityczne układów nanocząstki Au/nośnik tlenkowy, w reakcjach utleniania: a) CO (także w mieszaninie z H₂, tzw. selektywnego lub preferencyjnego utleniania CO, który to proces może znaleźć zastosowanie w oczyszczaniu strumienia H₂ [surowca do ogniw paliwowych] ze śladów CO. Celem tej reakcji jest utlenienie CO do CO₂ bez jednoczesnego utleniania H₂.) oraz b) węglowodorów C₃. W roku 2005 przedmiotem badań były:

- katalizatory Au/M^{II}Cr₂O₄ – kontynuacja wcześniejszych badań (por.zadanie badawcze „Utlenianie CO, etanu i propanu na układach nanocząstki złota/tlenki mieszane”)
- Au/MgF₂ i Au/MgO – cel: wyjaśnienie roli nośnika tlenkowego w procesie aktywacji O₂ na katalizatorach zawierających nanocząstki Au. Wyniki wstępnych badań wskazują na: 1) słabe oddziaływanie Au – nośnik nietlenkowy MgF₂, 2) niską aktywność układu Au/MgF₂ w utlenianiu CO w porównaniu z układami, w których Au jest zdyspergowane na nośnikach tlenkowych, 3) spadek aktywności po traktowaniu H₂ (w przeciwieństwie do układów Au/nośnik tlenkowy). Badania te będą kontynuowane.
- Au/Ti-SBA-15 (zawartość Ti 0.26 i 2.6 % wag.) – wstępne wyniki wskazują na zależność aktywności układów w utlenianiu CO od zawartości Ti; wysoka konwersja CO była obserwowana dla układu o niższej zawartości Ti. Katalizatory te są także aktywne w utlenianiu CO w obecności H₂ (selektywnym utlenianiu CO).

Na rysunku poniżej przedstawiono wyniki aktywności katalizatorów Au/Ti-SBA-15 w w reakcji selektywnego utleniania CO. Selektywność do CO₂ oznacza procent zużycia O₂ na utlenienie CO.



Rys1. Selektywne utlenianie CO na katalizatorach Au/Ti-SBA-15 w 50°C.

W dalszej części badań zostanie rozszerzony zakres próbek (różne stężenia Ti: 0.1-3% wag.) oraz zostanie przeprowadzona charakterystyka ich właściwości (szczególnie struktury centrów TiO_x).

10. Biokatalityczne utlenianie etylobenzenu i jego pochodnych

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

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 062 28 [2005-2007]

W ramach realizacji charakteryzacji biochemicznej i fizykochemicznej enzymu wykonano następujące badania:

- Opracowano metodę wybarwiania aktywnościowego żelu polikarylamidowego oczyszczonego białka EBDH, która pokazuje ko-migrację hemu z podjednostką gamma. Ponieważ przewiduje się, że w podjednostki α i β posiadają centra żelazowo-siarkowe i kofaktor molibdenowy, to podjednostka γ może zawierać właśnie hem typu b, obserwowany w spektroskopii UV-vis. Pomimo, że hem b nie jest kowalencyjnie związany z enzymem, to wiadomo, że niektóre białka zatrzymują wystarczająco dużo kofaktora, by mógł pozytywnie reagować w żelu rozwiniętym metodą SDS-PAGE.
- Przeprowadzono badania termodynamiki reakcji z etylobenzenem z pomocą izotermicznego kalorymetru titracyjnego. Przepadano zarówno całość reakcji, jak i cykl połówkowy (utlenienie substratu i redukcję enzymu). Badania wykazały egzotermiczny efekt całej reakcji w 30 i 20°C (odpowiednio $\Delta H = -153$ kJ/mol i -143 kJ/mol) oraz endotermiczny efekt reakcji połówkowej.
- Przebadano wpływ nadtlenu wodoru na widmo UV-vis białka, co pozwoliło postawić hipotezę mechanizmu deaktywacji EBDH na drodze rozkładu centrów żelazo-siarkowych. Zbadano widma białka w stanie utlenionym i zredukowanym. W zredukowanej formie uwidacznia się hem typu b.

Zaprojektowano komorę do pracy beztlenowej, dokonano rozpoznania cen materiałów, których zostanie wykonano, zaprojektowano system śluzy i połączeń elektrycznych oraz rozpoczęto przygotowania do montażu komory.

W ramach charakteryzacji spektrum substratowego EBDH w grupie przebadanych związków wykryto 16 substratów o następujących względnych aktywnościach właściwych (100% dla etylobenzenu): 1,4-dietylobenzen 35%, n-propylobenzen 14%, 2-etylotoluen 3.8 %, 3-etylotoluen 10 %, 4-etylotoluen 28 %, 2-etylnaftalen 9.3 %, 4-fluoroetylobenzen 15%, 2-etylofenol 56.14 ± 5.98 %, 3-etylofenol 19.39 ± 1.71 %, 4-etylofenol 259.01 ± 17.93 %, 2-etyloanilina 94.53 ± 3.59 %, 4-etyloanilina 136%, 3-etylopirydyna 16.94 ± 0.75 %, 2-etylofuran 134.05 ± 6.13 %, 2-etylotiofen 242.92 ± 16.60 %, 2-etylopirol 234.63 ± 4.40 %.

W ramach analizy chromatograficznej opracowano metodę rozdzielania mieszanin reakcyjnych metodą RP-HPLC dla etylofenoli i etylobenzenu. Dodatkowo przeprowadzono badania stechiometrii reakcji dla 5 wybranych substratów (Tabela 1). Badania chromatograficzne dowodzą, że produkt reakcji utlenienia jest bardziej polarny niż substrat. Stechiometria wykazuje zużycie ok. 2 równoważników ferrocenianu tetrafluoroboranu na grupę etylową, co oznacza dwuelektronową reakcję utlenienia.

Tabela 1. Testy stechiometryczne

Substrat	stosunek FCBF ₄ : substrat
etylobenzen	$2,2 \pm 0,2$
2-etylofenol	$2,5 \pm 0,03$
3-etylofenol	$2,3 \pm 0,1$
4-etylofenol	$2,3 \pm 0,2$
1,4-dietylobenzen	$4,9 \pm 0,2$

11. Mechanizm działania katalizatora rodowego do rozkładu tlenku diazotu w gazach emitowanych do środowiska

(prof. dr Jerzy Haber, mgr Małgorzata Nattich)

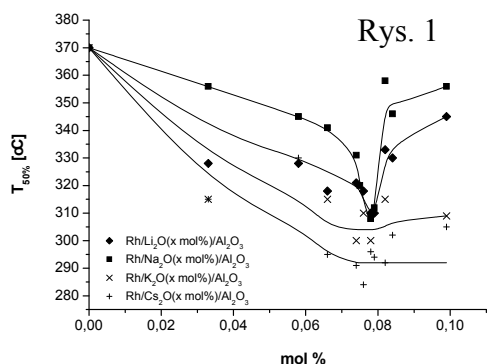
Projekt badawczy promotorski 3 T09D 010 28 [2005-2008]

Usuwanie N_2O z gazów przemysłowych stanowi dzisiaj ważny problem w ochronie środowiska. Najskuteczniejszą metodą jest katalityczny rozkład N_2O , który przebiega na katalizatorze rodowym osadzonym na przemysłowym $\gamma-Al_2O_3$. Stosowanie do tego celu przemysłowego Al_2O_3 zawiera zwykle znaczne ilości sodu. Nasuwa się pytanie w jakim stopniu obecność zanieczyszczeń jonami metali wpływa na aktywność katalizatora. Dlatego podjęto badania wpływu zawartości Li, Na, K, i Cs w trójtlenku glinu na aktywność katalityczną katalizatora rodowego.

Jako nośnik zastosowany został przemysłowy $\gamma-Al_2O_3$ (Procatalyse, Spheralite 531) zawierający śladowe ilości Na_2O (0,006% wag). Trójtlenek glinu impregnowano roztworami węglanów sodu, litu, potasu lub cezu, suszono w temperaturze $120^\circ C$ przez 2h a następnie prażono w temperaturze $550^\circ C$ przez 5h.

Tak przygotowany nośnik impregnowano wodnym roztworem azotanu rodu. Próbkę po wysuszeniu aktywowano w atmosferze redukującej w temperaturze $550^\circ C$. Do badań przygotowano katalizatory zawierające 0,1% wag. Rh różniące się między sobą zawartością pierwiastka alkalicznego (0,033-0,099% wag).

Testy katalityczne wykonywano w reaktorze przepływowym przy szybkości objętościowej $4000\ h^{-1}$ przy zastosowaniu azotu jako gazu nośnego. Stężenie N_2O w azocie wynosiło 1% obj., a badania prowadzono w przedziale temperaturowym od $200-500^\circ C$.



Rys. 1

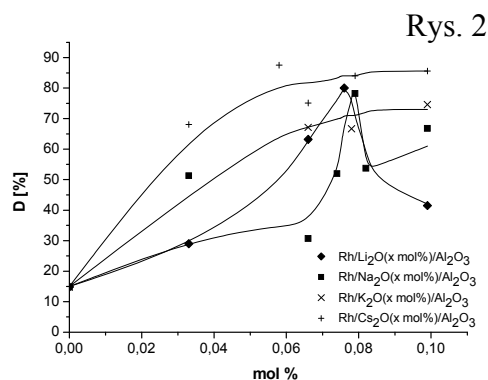
Rysunek 1 przedstawia zależność temperatury, w której osiąga się 50% konwersji N_2O , od zawartości Li_2O , Na_2O , K_2O lub Cs_2O wprowadzonego na powierzchnię $\gamma-Al_2O_3$. Widać, że niewielki dodatek pierwiastka alkalicznego powoduje gwałtowny wzrost aktywności katalitycznej, osiągając maksimum przy około 0,08% mol litu i sodu, podczas gdy w przypadku potasu i cezu obserwuje się stopniowy wzrost aktywności do ok. 0,07% wag. Powierzchnie właściwe BET badanych preparatów nie różniły się od siebie w istotny sposób co pokazuje, że

impregnacja kationami Li, Na, K i Cs nie modyfikuje tej powierzchni.

Ponadto przeprowadzono badania adsorpcji wodoru na wspomnianych katalizatorach. Celem tego badania było wyznaczenie dyspersji rodu na powierzchni katalizatora (Rys. 2). Stwierdzono, że jony metali alkalicznych obecne na powierzchni tlenku glinu powodują wzrost dyspersji rodu.

Porównanie krzywych z Rysunków 1 i 2 pokazuje, że zmiany aktywności katalizatora związane są ze zmianami dyspersji Rh.

Wyniki badań prowadzą do wniosku, że techniczny Al_2O_3 nie jest dobrym nośnikiem dla katalizatora Rh.



Rys. 2

12. Porównanie właściwości katalitycznych metaloporfiryn i ich μ -oxo-kompleksów w procesach utleniania węglowodorów

(prof. dr Jerzy Haber, mgr Edyta Tabor)

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 167 29 [2005-2008]

Przeprowadzono serię syntez porfiryn, które zawierały w położeniach *mezo* pierścienie fenyłowe z podstawnikami o różnym powinowactwie elektronowym. Podstawniki znajdujące się w pozycjach *mezo* w pierścieniu porfiryńowym wpływają na strukturę elektronową metaloporfiryny, która decyduje o aktywności katalitycznej w reakcjach przebiegających z przekazaniem ładunku. Podstawniki te mają charakter elektronodonorujący albo elektronoakceptorowy do pierścienia porfiryńowego.

Najprostszym otrzymanym ligandem porfiryńowym była tetra-fenyloporfiryńa, która jako podstawnik w pierścieniach fenyłowych zawiera atomy wodoru (TPP). Ponadto przeprowadzono syntezę porfiryn zawierających w pierścieniach fenyłowych różne podstawniki elektronoakceptorowe: T(p-Cl)PP, T(p-CF₃)PP, TPFPP lub elektronodonorowe: TMP, T(p-CH₃)PP, T(p-OCH₃)PP, TTP.

Kolejny etap prac stanowiła synteza metaloporfiryn manganowych, żelazowych i kobaltowych z powyższych ligandów. Jako źródło jonów metali przejściowych użyte były ich odpowiednie sole nieorganiczne: Mn(CH₃COO)₂·4H₂O, FeCl₂·4H₂O i Co(CH₃COO)₂·4H₂O.

Na właściwości fizykochemiczne i katalityczne metaloporfiryn wpływ ma nie tylko struktura pierścienia porfiryńowego i rodzaj metalu centralnego, ale także rodzaj ligandu aksjalnego, jeśli jest on przyłączony do metaloporfiryny. Ligand ten odgrywa znaczącą rolę w procesach utleniania związków organicznych. W badaniach tych jako ligand aksjalny wybrany został anion chlorkowy; w wyniku utworzenia wiązania chemicznego pomiędzy nim a metaloporfiryną jony metali przejściowych zmieniły stopień utlenienia z (II) na (III).

Proces syntezy ligandów jak również późniejszy etap otrzymania metaloporfiryn monitorowany był przy użyciu spektroskopii UV-Vis celem potwierdzenia poprawności syntezy ligandów i kompleksowania jonów metali przejściowych przez ligandy porfiryńowe. Ponadto wykonano pomiary uzyskanych katalizatorów metaloporfiryńowych z wykorzystaniem spektroskopii w podczerwieni (FTIR), by potwierdzić budowę strukturalną otrzymanych związków.

13. Mechanizm oddziaływania cząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy badań adsorpcji oraz zjawisk elektrokinetycznych

(prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk, mgr Aneta Michna)

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 145 29 [2005-2008]

Celem rozpoczętych w ramach niniejszego projektu prac było opracowanie konstrukcji nowego typu naczynka do pomiarów potencjału przepływu dla powierzchni heterogenicznych pokrytych warstewkami polielektrolitów i cząstek koloidalnych. Precyzyjny pomiar potencjału przepływu i potencjału zeta ma istotne znaczenie gdyż umożliwia określenie stopnia pokrycia powierzchni z dokładnością przewyższającą inne dostępne techniki badawcze. Pomiary te prowadzone były dotychczas przy użyciu kanału płasko-równoległego nie pozwalającego na regulację dystansu między ściankami. Ograniczało to dokładność pomiarów ze względu na znaczną rolę przewodnictwa powierzchniowego. Wadę tę wyeliminowano w nowym naczynku, którego istotną modyfikację stanowiła możliwość regulacji szczeliny pomiędzy powierzchniami poddawanych pomiarom. Dokonywano tego przez ruch prostokątnego tłoka połączonego ze śrubą mikrometryczną. Zastosowano czteroelektrodowy układ pomiarowy, z jedną parą elektrod do wyznaczania potencjału przepływu a drugą do pomiaru przewodnictwa elektrycznego. Przepływ elektrolitu w naczynku wymuszany był gradientem ciśnienia hydrostatycznego, mierzonego na wlocie i wylocie z kanału przy pomocy czujników piezoelektrycznych. Wskutek istnienia warstwy podwójnej w pobliżu powierzchni miki, przepływ elektrolitu powodował powstawanie różnicy napięć (potencjału przepływu), mierzonej na wlocie i wylocie przy pomocy elektrod chlorosrebrowych. Przy użyciu nowego naczynka przeprowadzono pomiary wstępne używając do jego kalibracji płytek miki, której właściwości powierzchniowe określono uprzednio w tradycyjnym naczynku. Wykazano, że dzięki zwiększonej precyzji, nowe naczynko w znaczący sposób rozszerza zakres pomiarowy, umożliwiając wyznaczenie potencjału zeta powierzchni dla wysokich sił jonowych.

KRAJOWE SIECI NAUKOWE

Nanomateriały jako katalizatory nowych, przyjaznych dla środowiska procesów

(prof. dr hab. Małgorzata Witko)

Krajowa i Międzynarodowa Sieć Naukowa KBN-MNiI

Aktualizacja bazy danych uczestników sieci

Bieżąca aktualizacja i uzupełnianie bazy danych adresowych wszystkich uczestników Sieci oraz podłączenie jej do strony internetowej Międzynarodowej Sieci Naukowej utworzonej na serwerze IKiFP PAN (<http://atom.ik-pan-krakow.pl/siec/index.html>). Strona ta stanowi źródło wiedzy na temat poszczególnych grup tematycznych i zakresu ich działalności w ramach Sieci. Zawiera informacje o celach, planach działania i spotkaniach Sieci.

Organizacja imprez naukowych

Sieć Katalityczna współorganizowała 37 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, które odbyło się w dniach 15–18.03. 2005 r w Krakowie. Uczestniczyło w nim 225 osób. Wygłoszono 8 wykładów plenarnych, 1 na zaproszenie, zaprezentowano 24 komunikaty i 194 postery. Opłata za uczestnictwo dla młodych naukowców została pokryta z funduszy Sieci. Dokumentację sympozjum zawiera wydana książka „Materiały XXXVII Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego” (ISBN 83-920331-2-4) stanowiąca załącznik do sprawozdania

Sieć Katalityczna współorganizowała również międzynarodowe sympozjum „*Catalysis on oxide-type materials. Theory and experiment: share needs and capabilities*”, 17-19.11.2005 r. W konferencji udział wzięło 120 osób. Wygłoszono 9 wykładów, 20 prezentacji typu oral i zaprezentowano 29 posterów. Opłata za uczestnictwo dla młodych naukowców i części wykładowców została pokryta z funduszy Sieci. Dokumentację zawarta jest w książce Book of abstracts “*Catalysis on oxide-type materials: Theory and experiment: share needs and capabilities*” (ISBN 83-920331-7-5) będącej załącznikiem do sprawozdania.

Posiedzenia przedstawicieli uczestników sieci

Dnia 16.03.2005 odbyło się spotkanie przedstawicieli uczestników Sieci na którym złożono sprawozdanie z działalności sieci w roku 2004. Z kolei dnia 19.11.2005 spotkała się Grupa Koordynatorów Sieci. Odbyły się również spotkania grup tematycznych, m. in. grupy prof. R. Dziembaja - Naturalne i syntetyczne minerały warstwowe jako podstawa nanostruktur katalitycznych”, prof. B. Grzybowskiej- Świerkosz - „Monomolekularne i makroklastrowe nanocząstki związków chemicznych (tlenków, siarczków) na nośnikach i matrycach”, prof. M. Ziółek - „Nowe materiały nano- i mikroporowate” oraz grupy prof. W. Bartzaka - „Projektowanie katalizatorów w oparciu o różne podejścia teoretyczne”.

Rezultatem pracy kilku zespołów badawczych sieci jest projekt badawczy zamawiany MEiN „Nowe materiały katalitycznej jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska”, skierowany do realizacji decyzją Ministra Edukacji i Nauki z dnia 12 grudnia 2005 r. (decyzja nr K124/T09/2005).

Zespoły badawcze Ogólnopolskiej Sieci Katalitycznej aktywnie uczestniczą w programach ramowych Unii Europejskiej: (CA) CONCORDE “Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in Europe, (ToK)TOCATA “Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts”, (ERANet) ACENET “Applied Catalysis European Network”, (NoE) IDECAT “Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production”.

PROJEKTY 5. PROGRAMU RAMOWEGO UE

1. Friendly Heating: Comfortable to People and Compatible with Conservation of Art Works Preserved in Churches

(doc. dr hab. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, dr Antonina Kozłowska, mgr Sławomir Jakiela)

Projekt badawczy EU 5th FP EVK4-CT-2001-00067 FRIENDLY HEATING (STREP) [2001-2005]

Większość zabytkowych kościołów jest ogrzewanych w okresie chłodnym sporadycznie, wtedy kiedy są użytkowane. Pojawiające się na krótko w czasie epizodów grzewczych gwałtowne spadki wilgotności względnej powietrza, powodują odparowanie wilgoci zawartej w materiałach i skurcz takich obiektów jak drewniane elementy polichromowane. Celem projektu badawczego FRIENDLY HEATING było opracowanie nowego, prototypowego systemu grzewczego, dostarczającego ciepło lokalnie w strefach, gdzie znajdują się ludzie, bez zmian warunków w otoczeniu zabytkowych elementów wyposażenia kościoła. W ciągu 3 lat realizacji projektu zespół badawczy instytutu przeprowadził pomiar zmian metrycznych rzeźbionych elementów zabytkowego drewnianego ołtarza w kościele w Rocca Pietore we Włoszech w odpowiedzi na fluktuacje temperatury i wilgotności względnej w jego otoczeniu, pod wpływem różnych systemów grzewczych. Wykonano również systematyczne modelowanie numeryczne naprężeń mechanicznych w drewnie wywołanych przez te fluktuacje i określono krytyczne wielkości fluktuacji powyżej których pojawiają się uszkodzenia drewna..

W 2005 roku, ostatnim roku trwania projektu, zrealizowano bezpośrednie pomiary poziomu naprężeń w drewnie metodą emisji akustycznej, w celu doświadczalnego potwierdzenia wyników modelowania numerycznego. Wykazano, że sygnały dźwiękowe powodowane przez niszczące fluktuacje wilgotności względnej mają charakterystyczną częstotliwość 100-300 kHz, co stwarza możliwość rozróżnienia i odfiltrowania efektów pochodzących od temperatury i hałasów zewnętrznych. Sygnały emisji akustycznej zarejestrowano dla elementów drewnianych poddanych fluktuacjom parametrów mikroklimatycznych najpierw w kontrolowanych warunkach laboratoryjnych, a następnie in situ w kościele w Rocca Pietore. Stwierdzono korelację pomiędzy amplitudą fluktuacji wilgotności względnej powietrza, a energią impulsów emisji akustycznej. W szczególności zaobserwowano zanik emisji akustycznej przy zmniejszeniu się amplitudy fluktuacji wilgotności względnej poniżej wartości progowej. Otrzymane wyniki potwierdziły, że sygnał akustyczny, po odpowiedniej kalibracji, może stać się doskonałym wskaźnikiem zagrożenia zabytkowych obiektów drewnianych przez fluktuacje mikroklimatu i może być z powodzeniem zastosowany do monitorowania muzeów i budowli zabytkowych.

Na zakończenie projektu zorganizowano dwudniowy warsztat upowszechniający jego wyniki w Polsce. Odbił się on w Muzeum Narodowym w Warszawie w dniach 13 i 14 kwietnia. Program warsztatu objął 9 prezentacji przez członków zespołu badawczego oraz dyskusję panelową z wprowadzeniem przez trzech polskich ekspertów i wypowiedziami wszystkich uczestników. W warsztacie wzięło udział około 100 uczestników – przedstawiciele państwowych i kościelnych władz konserwatorskich, odpowiedzialnych za ochronę zabytków architektury, konserwatorów, wykładowców i studentów wydziałów konserwacji, inżynierów i przedstawiciele firm pracujących w dziedzinie ogrzewania kościołów.

2. Roman Cement to Restore Built Heritage Effectively

*(doc. dr hab. Roman Kozłowski, dr Grzegorz Adamski,
dr Łukasz Bratasz, dr Antonina Kozłowska, dr Dariusz Mucha,
inż. Bogna Napruszewska)*

Projekt badawczy EU 5th FP EVK4-CT-2002-00084 ROCEM
(STREP koordynacja) [2002-2006]



Cementy romańskie – naturalne spoiwa hydrauliczne – były szeroko stosowane do dekoracji elewacji budynków w XIX wieku i początkach XX wieku ze względu na ich bardzo krótkie czasy wiązania, dekoracyjny kolor i doskonałą odporność na niszczenie. Obecnie materiały te nie są dostępne na rynku. Celem realizowanego projektu jest przywrócenie ich wytwarzania i stosowania w konserwacji zabytków architektury. Instytut jest jednostką koordynującą projekt. Zadaniem badawczym zrealizowanym przez Instytut w okresie sprawozdawczym (3. roku realizacji projektu) były:

- uzyskanie informacji odnoszących się do pierwotnej estetyki i techniki wykonania elewacji budynków dekorowanych w technologii cementów romańskich

Wspólnie z Miejskim Konserwatorem Zabytków, dokonano badań konserwatorskich zespołu elewacji 12 szkół miejskich Krakowa powstałych w latach 1879-1914 i dekorowanych tynkami romańskimi. Dla każdego obiektu opracowano informację historyczną, przeanalizowano dostępne materiały archiwalne, przygotowano dokumentację fotograficzną oraz przeprowadzono badania technologiczne i mikroskopowe. Stwierdzono duże zróżnicowanie uziarnienia i grubości warstw technologicznych. Zaprawy romańskie były często łączone z zaprawami cementowo-wapiennymi i wapiennymi, a całość dekoracji była zazwyczaj pokrywana powłoką czystego cementu romańskiego w celu uzyskania jednorodnego efektu estetycznego.

- opracowanie kryteriów kompatybilności - zgodności technologicznej - nowych zapraw naprawczych z zaprawami historycznymi

Stwierdzono, że głównym kryterium kompatybilności jest swobodny przepływ wody przez powierzchnię kontaktu pomiędzy zabytkowym podłożem i zaprawą naprawczą. Przeszkody w przepływie wody prowadzą do stref uszkodzeń w wyniku krystalizacji lodu i soli. Rozkład wilgoci w przekroju połączeń podłoża i zapraw w trakcie suszenia określano przy zastosowaniu obrazowania Magnetycznym Rezonansem Jądrowym. Badania te pokazały, że powierzchnia kontaktu tynków i cegieł w próbkach pobranych z zabytkowych elewacji nie zakłóca swobodnego przepływu wody. Badania te zostały potwierdzone zdjęciami skaningowej mikroskopii elektronicznej, które wskazały na doskonałą adhezję tynku do cegły, jak i obecność dużych porów w tynku umożliwiających transport wody i pary wodnej.

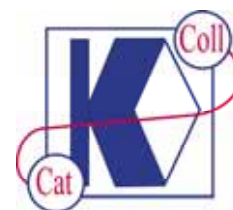
- uzyskanie większych ilości cementów romańskich wysokiej jakości

Przeprowadzono w dużej skali wypały margli pozyskanych z dwóch źródeł geologicznych w Polsce i Austrii wybranych w poprzednim roku realizacji projektu. Otrzymano 2 cementy różniące się kolorem i wczesną wytrzymałością mechaniczną bezpośrednio po stwardnieniu. Wytworzone cementy zostały poddane przez partnerów konserwatorskich projektu testom praktycznym.

3. Centre of Excellence – Cracow Research Centre of Molecular Catalysis and Soft Matter Chemistry

(doc. dr hab. Piotr Warszyński)

Projekt EU 5th FP G5MA-CT-2002-04024 CATCOLL (CoE) [2002-2005]



Rok 2005 był ostatnim rokiem realizacji programu „Centrum Doskonałości” finansowanego w ramach projektu Komisji Europejskiej. Jego celem było wzmocnienie roli Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni Polskiej Akademii Nauk jako wiodącego ośrodka badawczego w dziedzinie katalizy molekularnej i chemii koloidów w Europie i jego integracja z Europejskim Obszarem Badawczym (ERA). Szczególnym celem naszego działania był aktywny udział Instytutu w 6-tym Programie Ramowym Komisji Europejskiej. W ciągu trzech lat działania CATCOLL w ramach 6-go Programu Ramowego zostały zgłoszone liczne propozycje projektów (3-IP, 6-NoE, 14-CA, 3-SSA), w tym pięć projektów złożono w roku 2005. Około 30% złożonych wniosków zostało przyjętych i aktualnie realizowane jest dziewięć projektów w ramach 6-tego Europejskiego Programu Ramowego z których cztery są koordynowane przez IKFP. Aby wzmocnić integrację Centrum z ERA zorganizowano kilkanaście wizyt pracowników badawczych Centrum w wiodących europejskich instytucjach naukowych. Innym działaniem integracyjnym było uczestnictwo w konferencjach naukowych o międzynarodowym zasięgu. Celem było nawiązanie tak wielu kontaktów jak to jest możliwe, mając na myśli perspektywę 7-go Europejskiego Programu Ramowego. W 2005 roku Centrum przyjęło wielu gości z krajów Unii Europejskiej, lub krajów stowarzyszonych, którzy bądź to uczestniczyli w konferencjach i warsztatach organizowanych przez Centrum jako zaproszeni wykładowcy, lub mieli specjalne wykłady dla pracowników naukowych lub doktorantów Instytutu. Centrum odniosło pełny sukces jeśli chodzi o tworzenie sieci naukowo – badawczych na poziomie krajowym. Instytut koordynuje aktualnie działalność dwu krajowych sieci: "Nanomateriały jako katalizatory dla nowych przyjaznych dla środowiska procesów" i "SURUZ Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i w praktyce" oraz jest aktywnym uczestnikiem trzech innych sieci krajowych a także współpracuje z innymi Centrami Doskonałości w Polsce. Jest również jednym z założycieli Krajowego Laboratorium Badań Powierzchni. Jako dowód uznania wysokiej pozycji Instytutu w dziedzinie koloidów i fizykochemii powierzchni została Instytutowi przyznana rola organizatora prestiżowej konferencji European Colloid and Interface Society w 2008 roku. Zorganizowano osiem wizyt badawczych dla doktorantów, finansowanych całkowicie lub współfinansowanych w ramach Centrum, w wiodących europejskich ośrodkach naukowych. Ogółem siedemnastu doktorantów uczestniczyło w konferencjach naukowych i warsztatach. Przedstawiciele doktorantów uczestniczyli w warsztatach poświęconych możliwościom korzystania z międzynarodowych stypendiów naukowo badawczych.

W maju 2005 zorganizowano Międzynarodowe Sympozjum "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces". Sympozjum stworzyło sposobność spotkania się 65 naukowców z różnych krajów europejskich, specjalizujących się w różnych aspektach adsorpcji polielektrolitów i cząstek koloidalnych na makroskopowych powierzchniach. Program Sympozjum obejmował 11 wykładów zaproszonych naukowców i 25 prezentacji. Innym naukowym wydarzeniem było Międzynarodowe Sympozjum "Catalysis on oxide type materials. Theory and experiment: share needs and capabilities", zorganizowane wspólnie z programami CATCOLL, CONCORDE EC i Polish Network on Catalysis. Głównym celem spotkania było zacieśnienie współpracy pomiędzy teoretykami i eksperymentatorami w dziedzinie katalizy na materiałach tlenkowych, dla uzyskania lepszego zrozumienia zjawisk katalitycznych.

PROJEKTY 6. PROGRAMU RAMOWEGO UE

1. Dynamics in Nano-scale Materials Studied with Synchrotron Radiation

(prof. Józef Korecki, dr Nika Spirids, dr Tomasz Ślęzak,
mgr Kinga Freindl)

Projekt badawczy EU 6th FP NMP4-CT-2003-001516 DYNASYNC
(STREP koordynacja) [2004-2007]



W ramach projektu DYNASYNC w roku 2005 Instytut realizował następujące zadania:

1. Opracowanie i uruchomienie spektrometru Magneto-Optycznego Efektu Kerra w warunkach ultra wysokiej próżni. Zadanie zostało zrealizowane we współpracy z AGH, a pierwsze wyniki dotyczą struktury namagnesowania warstw Fe na W(110)
2. Wzrost i dyfuzja w cienkich warstwach Fe na powierzchni W(110) ze stopniami. Badano wzrost Fe na płaskich i wycinalnych powierzchniach wolframu za pomocą skaningowej mikroskopii tunelowej. Pomiary rezonansowego rozpraszania jądrowego promieniowania synchrotronowego przeprowadzone in situ przy użyciu skonstruowanej w ramach projektu aparatury ultra wysokiej próżni pozwoliły stworzyć model dyfuzji atomów Fe w monowarstwie.
3. Kinetyka wzrostu metalicznych nanocząstek na tlenkowych podłożach. Wzrost nanostruktur złota na powierzchni magnetytu został scharakteryzowany przy użyciu skaningowej mikroskopii tunelowej oraz przy pomocy niskokątowego rozpraszania promieniowania X w geometrii kąta poślizgu (GISAXS). Kinetyka procesu formowania się klasterów Fe na MgO(100) badana była przy użyciu GISAXS i spektroskopii mössbauerowskiej elektronów konwersji (CEMS).
4. Utlenianie powierzchni i warstw granicznych w układzie Fe(001)/MgO. Wykonano analizy CEMS przy użyciu sondy ⁵⁷Fe zlokalizowanej w interesującym obszarze próbki (na powierzchni lub w warstwie granicznej). Dokonano identyfikacji faz tlenkowych wczesnych stadiów utleniania.
5. Wibracyjne gęstości stanów dla nanostruktur żelaza na W(110) i Mo(110) pokrytych srebrem. Widma fononowe wyznaczone były przy użyciu nieelastycznego jądrowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego. Porównano transport fononów poprzez warstwy graniczne Fe/W(110), Fe/Mo(110) oraz Fe/Ag.
6. Zależności rozmiarowe i temperaturowe wibracyjnych gęstości stanów w ultracienkich warstwach i nanostrukturach Fe na W(110). Dzięki aparaturze skonstruowanej przy ID18 w ESRF Grenoble dokonano analizy wpływu efektów rozmiarowych na widma fononów w cienkich warstwach Fe na W(110) w zakresie od monowarstwy do kilkudziesięciu warstw atomowych. W wibracyjnych gęstościach stanów zaobserwowano przejście od układu trójwymiarowego do kwazi-dwuwymiarowego jako istotne zmiękczenie sieci oraz wyraźną anizotropię parcjalnych gęstości stanów wzdłuż wysokosymetrycznych kierunków krystalograficznych.
7. Struktura namagnesowania w warstwach Fe na W(110). Zbadano reorientację spinową w płaszczyźnie warstw porównując jej charakter dla warstw płaskich i ze stopniami.

Instytut realizował również liczne zadania związane z koordynacją projektu:

1. Przygotowanie raportów: rocznego, częściowego po 18-stu miesiącach projektu
2. Przygotowanie oceny realizacji projektu (Mid-Term Assessment)
3. Rozdział drugiej raty projektu
4. Przygotowanie spotkań projektu zarówno managementowych jak i naukowych - odbyły się 4 spotkania, w tym 2 o charakterze czysto naukowym.

Raport roczny, po drobnych uzupełnieniach, został zaakceptowany przez Komisję Europejską, która zaakceptowała również raport po 18-stu miesiącach i pozytywnie oceniła projekt w połowie jego trwania.

2. Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts

(prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Projekt EU 6th FP MTKD-CT-2004-509832 TOK-CATA

(ToK koordynacja) [2004-2008]



Projekt TOK-CATA jest projektem transferu wiedzy, realizowanym przez cztery lata w okresie 01.10.2004 – 30.09.2008. Instytut Katalizy i Fizykochemii PAN w Krakowie jest instytucją goszczącą projektu. Instytut odpowiada za całość działań badawczych i organizacyjnych, które obejmują: rekrutację zagranicznych specjalistów oraz organizację ich pobytu w Polsce, przygotowanie szczegółowych programów pracy zatrudnionych specjalistów, udostępnienie lub stworzenie potrzebnej infrastruktury badawczej, zapewnienie uczestnictwa w projekcie naukowców o dużym doświadczeniu, którzy podejmą się naukowej opieki nad realizowanymi badaniami, zapewnienie przepływu informacji i rozpowszechnienia wyników badań poprzez organizację warsztatów i spotkań, uczestnictwo w konferencjach, publikacje w czasopiśmie naukowych, opracowanie wniosków patentowych, zarządzanie projektem, ze szczególnym naciskiem na efektywną komunikację z organizacjami partnerskimi i Komisją Europejską

Intencją projektu jest powiązanie długiej tradycji badań nad materiałami porowatymi w Instytucie z doświadczeniami naukowców z innych placówek badawczych zainteresowanych 'inteligentnym' projektowaniem katalizatorów porowatych. Projekt dotyczy następujących kluczowych kierunków badań nad materiałami porowatymi:

- projektowanie, synteza i optymalizacja materiałów porowatych opartych na zeolitach, modyfikowanych krzemianach warstwowych i uporządkowanych strukturach mezoporowatych
- sterowanie teksturą, morfologią ziaren i wprowadzaniem centrów aktywnych po kątem zastosowań w syntezie specjalistycznych związków chemicznych i do usuwania zanieczyszczeń powietrza
- powiązanie teoretycznego modelowania symulacyjnego struktur porowatych z projektowaniem katalizatorów

W ramach projektu Instytut rozpoczął współpracę z organizacjami partnerskimi:

- Profesor Ewa Serwicka-Bahranowska rozpoczęła prace badawcze w Wielkiej Brytanii na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Nottingham, który wniesie doświadczenie w syntezie krzemianów mezoporowatych o kontrolowanej morfologii ziaren.
- Docent Bogdan Sulikowski rozpoczął współpracę z Wydziałem Chemii Uniwersytetu w Sztutgarcie w Niemczech, który udostępni zaawansowaną aparaturę NMR do badania katalizatorów *in situ* w warunkach reakcji katalitycznej. Ponadto Dr Rafał Rachfalik rozpoczął stypendium na Uniwersytecie w Sztutgarcie.
- Docent Bogdan Sulikowski rozpoczął również współpracę z Instytutem Katalizy i Petrochemii w Madrycie w Hiszpanii, który udostępni unikatową aparaturę do charakterystyki katalizatorów *in situ* i wniesie doświadczenie w projektowaniu aparatury do testów katalitycznych.
- Dr Dorota Rutkowska-Żbik zakończyła realizację prac badawczych na Wydziale Chemii Teoretycznej Uniwersytetu w Lund, w Szwecji, który udostępni zaawansowane metody obliczeń teoretycznych.

Jednocześnie Instytut przeprowadził rekrutację 4 naukowców z zagranicy posiadających doświadczenie w opisanym zakresie badań. Dr Leszek Góra, dr Dorota Duraczyńska oraz dr Helena Palkova zostali zatrudnieni na okres 1 roku. Instytut rozpoczął współpracę z profesorem Michaeliem Hungerem z Uniwersytetu w Sztutgarcie.

3. Scientific Network - Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practise

(prof. dr hab. Kazimierz Małysa)

Projekt EU 6th FP INCO-CT-2003-003355 SURUZ
(SSA koordynacja) [2004-2007]



Podstawowym celem projektu „SURUZ”, koordynowanego przez IKiFP PAN, jest rozwinięcie współpracy naukowej pomiędzy jednostkami naukowymi w Polsce, zajmujących się różnymi aspektami badań nad substancjami powierzchniowo aktywnymi i układami zdyspergowanymi. W realizacji projektu „SURUZ” uczestniczą 24 zespoły z 14 instytucji naukowych w całej Polsce. Organizacja tej sieci naukowej ma na celu ułatwienie wymiany osobowej, informacji i współpracy naukowej. Powinna przyczynić się do bardziej optymalnego użytkowania aparatury i infrastruktury badawczej będącej w posiadaniu zespołów badawczych sieci oraz przeciwdziałać rozdrobnieniu i/lub powielaniu tematów badawczych. Nacisk jest położony na rozwijanie współpracy naukowej, a szczególnie wspierana jest współpraca pomiędzy doktorantami i młodszymi naukowcami.

Dla osiągnięcia celów projektu SURUZ, zostały one zgrupowane w pięciu grupach zadań (WP: workpackages). Pierwsza grupa zadań (WP1 „Kick-off meeting”) została zrealizowana w 2004. Druga (WP2) „Networking” została zapoczątkowana natychmiast po Kick-off Meeting-u. W okresie sprawozdawczym 63 naukowców (głównie doktorantów) odwiedziło i zapoznało się z laboratoriami i wyposażeniem dostępnym w laboratoriach grup i jednostek naukowych sieci SURUZ. Naukowcy z instytucji partnerskich zaprezentowali 14 wykładów na seminariach w odwiedzanych jednostkach. Całkowita liczba wyjazdów pracowników zespołów członków sieci oraz doktorantów do laboratoriów w jednostkach partnerskich, udziałów w warsztatach, konferencjach oraz spotkaniach klasterowych organizowanych i/lub współorganizowanych przez sieć SURUZ wyniosła 564. W ramach grupy zadań WP3 (*“Thematic workshops for young scientists”*) zostały zorganizowane 3 warsztaty naukowe dla młodych naukowców. Dwa z nich: “SURUZ Workshop for Young Scientists” (9.XI.2004, 37 uczestników) oraz „Technologies for Characterization of Liquid and Solid Interfaces” (18-19.V.2005, 48 uczestników) zostały zorganizowane przez IKiFP PAN, a trzeci “Nano- and Microdispersed Systems” (22.IV.2005, 19 uczestników) był zorganizowany przez Politechnikę Krakowską. Specjalna Sesja Młodych była zorganizowana w czasie Konferencji SURUZ w Polanicy (1-3.VI.2005). Każda grupa tematyczna (klaster) (WP4 *“Cluster workshops”*) zorganizowała swoje doroczne spotkanie. Spotkanie Klasteru A “Interfaces, Surfactants and Dispersed Systems” było zorganizowane przez UMCS (12-14.IV.2005, 62 uczestników), Klasteru B zorganizowała Politechnika Wroclawska (1-2.IV.2005, 23 uczestników), Klasteru C “Emulsions for Food, Cosmetics, Pharmaceutical and Household Use” (19-20.VI.2005, 35 uczestników) zorganizowała Politechnika Gdańska, Klasteru D - PWr (31.III.- 01.IV.2005, 23 uczestników). W ramach grupy zadań WP5 *“Network conferences”* zostały zorganizowane 3 konferencje współfinansowane ze środków projektu. Duża konferencja sieci “SURUZ” (ponad 130 uczestników) była zorganizowana przez prof. K.Wilk (PWr) w Polanicy w dniach 31.V-4.VI.2005. Druga konferencja (20-23.VI.2005, 120 uczestników) “Oils & Environment Intern. Conf.” była zorganizowana przez prof. J.Hupka (PGd), a trzecią (21-22.IV.2005, 38 uczestników) “Separation processes in dispersed systems” zorganizowała Politechnika Poznańska. Prace koordynacyjne projektu WP6 *“Coordination”* wykonuje zespół: prof. K.Małysa (koordynator), doc. P.Warszyński (zastępca), dr L.Szyk-Warszyńska (sekretarz). Projekt posiada stronę internetową: www.cyf-kr.edu.pl/~ncmalysa/. Raport etapowy z pierwszych 12 miesięcy realizacji projektu został przygotowany i przyjęty (z gratulacjami) przez UE. Środki finansowe na kolejny etap projektu zostały przysłane z UE i przekazane do instytucji partnerskich w grudniu 2005.

4. Annual Polish Conferences Are Setting up a New Platform for Dissemination of Knowledge in the Field of Catalysis

(doc. dr hab. Bogdan Sulikowski)

Projekt EU 6th FP NMP3-CT-2004-510318 POL-CAT (SSA koordynacja) [2004-2007]

Celem projektu jest szerokie rozpropagowanie najnowszej wiedzy w zakresie katalizy, sformowanie efektywnego forum dla wymiany informacji i doświadczeń pomiędzy naukowcami, ośrodkami badawczymi i przemysłem. W szczególności celowi temu będzie służyć zorganizowanie krajowych konferencji naukowych w zakresie katalizy w Krakowie. Umożliwi to nawiązanie nowych i umocnienie istniejących kontaktów pomiędzy uczonymi z Polski i specjalistami z Unii Europejskiej, krajów stowarzyszonych, a także, jeśli wyniknie taka potrzeba, z krajów pozaeuropejskich.

Projekt obejmuje zorganizowanie trzech konferencji krajowych nt. katalizy, w latach 2004-2006. Konferencje będą się odbywały w gmachu Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie.

W dniach 15-18 marca 2005 zorganizowano drugą z zaplanowanych konferencji, czyli **37 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne**. W konferencji wzięło udział 240 zarejestrowanych uczestników. W związku z tym wykonano następujące prace:

- wyłoniono komitet naukowy
- ustalono tematykę w porozumieniu z komitetem naukowym
- założono stronę internetową z informacjami dot. konferencji
- wybrano i zaproszono mówców plenarnych krajowych oraz zagranicznych
- zakupiono niezbędne do realizacji projektu materiały (SPUB-M do POL-CAT-u i POL-CAT).
- wydrukowano, umieszczono w internecie i rozesłano program kolokwium
- zredagowano i wydano tom obejmujący materiały konferencyjne (392 strony)
- przeprowadzono 37 OKK
- przygotowano do druku materiały w celu edycji specjalnego tomu *Catalysis Today* "Nano-Structured Materials for Catalysis", obejmującego wybór prac prezentowanych podczas 37 OKK, a także prace nadesłane na zaproszenie (B. Sulikowski – Guest Editor).

W 2005 roku ukazał się zeszyt specjalny *Catalysis Today* "Oxide-Based Materials in Catalysis", vol. **101**, issue 2, 30 marca 2005 (ISSN 0920-5861). *Guest Editor*: B. Sulikowski. W tomie opublikowano wybór prac przedstawionych podczas 36 OKK w Krakowie w 2004 roku.

5. Nanocapsules for Targeted Controlled Delivery of Chemical Studies of the attachment of microcapsules to stainless steel surface and permeability of microcapsule shells

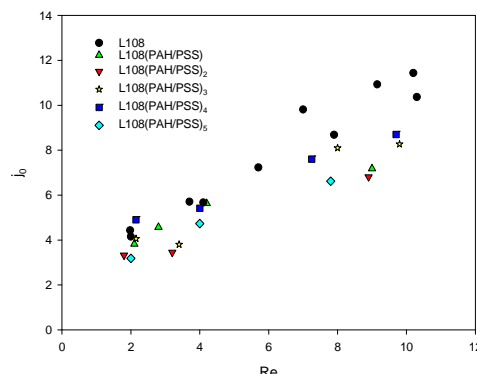


(Doc. dr hab. Piotr Warszyński, dr Lilianna Szyk-Warszyńska,
dr Maria Zembala, mgr Marta Kolasińska, mgr Anna Trybała)

Projekt badawczy EU 6th FP NMP4-CT-2003-001428 NANOCAPS (STREP) [2004-2007]

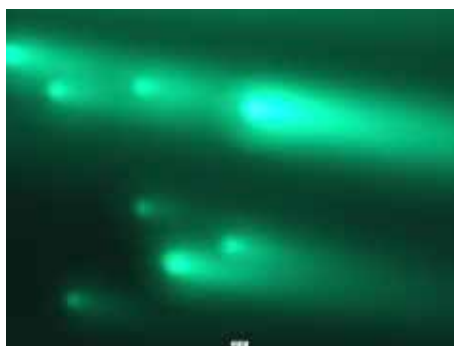
Głównym celem projektu NANOCAPS jest rozwinięcie nowych technologii opartych na mikro-enkapsulacji, mających na celu rozwiązanie problemów kontrolowanego transportu i uwalniania związków aktywnych poprzez wytworzenie nowych nano-materiałów oraz pokryć nano-kompozytowych, dla redukcji kosztów produkcji nano-kapsulek poprzez zastosowanie zdobytej wiedzy dla użycia mikrokapsulek w zastosowaniach: biomedycznych (środki antyalergiczne, biostatyczne) oraz przy wytwarzaniu samo-reperujących się pokryć metalowych. Adhezja mikrokapsulek do powierzchni i tworzenie trwałych pokrycia w warunkach przepływu cieczy jest jednym z istotnych problemów dla praktycznych zastosowań. Badano problem osadzania mikrokapsulek na modelowej powierzchni miki oraz na powierzchni stali nierdzewnej. W badaniach eksperymentalnych używano "celki ze skośnym napływem", która pozwala obserwować proces osadzania na nieprzezroczystych powierzchniach. Modelowymi kapsułkami były cząstki lateksu o średnicy 1 μm pokryte powłoką polielektrolitową (PE) o różnej grubości. Powłoki te były tworzone za pomocą sekwencyjnej adsorpcji warstw polikationów i polianionów z ich roztworów (technika LbL).

Użyliśmy modelowych polielektrolitów PAH/PSS oraz naturalnych – chitosan/algina. Grubość poszczególnych warstw PE była wyznaczana za pomocą pomiarów elipsometrycznych. W procedurę tworzenia powłok zmodyfikowano na etapie płukania, wprowadzając ultrafiltrację zamiast poprzednio używanego wirowania, co pozwoliło otrzymać monodispersyjne zawiesiny mikrokapsulek. Na Rys. 1. przedstawiono zależność zredukowanego strumienia mikrokapsulek do silanowanej powierzchni miki (naładowanej dodatnio) będącego miarą



Rys. 1. Szybkość osadzania mikrokapsulek

szybkości osadzania od natężenia przepływu (wyrażonego jako liczba Reynoldsa) oraz od ilość warstw (PAH/PSS). Niezależnie od grubości powłoki, szybkość osadzania jest bliska maksymalnej, uzyskanej dla bezbarierowego elektrostatycznego osadzania, jako że powłoki zakończone PSS są ujemnie naładowane. Wyniki pokazują, że osadzanie jest nieodwracalne,



Rys. 2. Uwalnianie fluoresceiny z mikrokapsulek z powłoką CHIT/ALG

ponieważ nie obserwuje się odczepiania się kapsulek, nawet w przypadku długiego przepłukiwania w warunkach dużego przepływu.

Opracowano również metodę obserwacji szybkości uwalniania enkapsulowanych materiałów. Metoda oparta jest na bezpośredniej obserwacji uwalniania fluorescencyjnego barwnika z kapsułki przyczepionej do powierzchni. Profil intensywności fluorescencji wokół takiej mikrokapsułki obserwujemy przy użyciu układu składającego się z mikroskopu fluorescencyjnego, kamery oraz systemu analizy obrazu. Rys. 2 przedstawia przykładowy obraz uwalniania fluoresceiny z kapsulek pokrytych parą chitosan/algina.

6. Global Climate Change Impact on Built Heritage and Cultural Landscapes

(doc. dr hab. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, mgr Sławomir Jakiela)

Projekt badawczy EU 6th FP SSP1-CT-2003-501837 NOAH'S ARK (STREP) [2004-2008]



Celem projektu jest określenie parametrów i zmian meteorologicznych, które w sposób krytyczny w okresie najbliższych 100 lat wpłyną na materialne środowisko zabytkowe, oraz opracowanie i upowszechnienie strategii ograniczania płynących zagrożeń. Zadania grupy badawczej instytutu skupiają się na opracowaniu wskaźników zagrożeń historycznych materiałów wrażliwych na oddziaływanie wilgoci i temperatury, takich jak drewno lub piaskowce o spoiwie ilastym, które opisałyby względny wpływ klimatu na postęp zniszczeń w tych materiałach.

Głównym zadaniem badawczym w okresie sprawozdawczym było opracowanie nowego, bardziej doskonałego wskaźnika zagrożeń klimatem zabytkowych budowli drewnianych wystawionych na oddziaływanie atmosferyczne. Mechanizmem niszczącym jest wzrost grzybów niszczących drewno po przekroczeniu krytycznych poziomów dostępności wilgoci potrzebnej do życia grzybów. Założono, że opady i temperatura są dominującymi czynnikami klimatycznymi warunkującymi wzrost grzybów i że zależność pomiędzy szybkością wzrostu a temperaturą jest liniowa powyżej dolnej granicy wynoszącej 2°C.

Opracowany wskaźnik uwzględnia rzeczywistą głębokość penetracji wody i wynikającą z niej rzeczywistą objętość drewna zaatakowanego przez grzyby. Transport wody przez 3 gatunki drewna, preferowane w przeszłości w Europie przez budowniczych i rzemieślników, został zmierzony przy zastosowaniu obrazowania Magnetycznym Rezonansem Jądrowym. Określono profil zawartości wilgoci w drewnie w funkcji czasu opadu zwilżającego zewnętrzną powierzchnię elementu drewnianego. Zastosowano model dwu-stopniowej infiltracji, który uwzględnia bardzo szybki transport wody przez naczynia kapilarne połączone z jej wolniejszą infiltracją do gęstszej struktury drewna otaczającej kapilary. Model ten pozwolił na numeryczną symulację profilu penetracji wody do drewna dla dowolnego epizodu opadów deszczu. Profil ten został wyrażony jako czas w ciągu którego zawartość wilgoci w danej odległości od powierzchni zewnętrznej przekracza krytyczną wartość 20%. Krytyczna wartość odpowiada zawartości wilgoci powyżej której możliwy jest wzrost grzybów. Epizody infiltracji wilgoci są łączone w miesięczne profile penetracji wody odpowiadające skumulowanemu iloczynowi objętości i czasu, w których niszczący wzrost grzybów był możliwy.

Końcowy wzór Wskaźnika Zagrożenia Dziedzictwa Kultury przez Klimat (CRI_{CH}) przyjął następującą postać:

$$CRI_{CH} = \sum_{\text{styczeń}}^{\text{grudzień}} (T - 2) \int_0^{D_{\max}} t_{\text{kryt}}(D) dD$$

gdzie: T jest średnią miesięczną temperaturą w °C, $t_{\text{kryt}}(D)$ jest czasem w danym miesiącu, w którym zawartość wilgoci w odległości D od powierzchni drewna przekroczyła poziom krytyczny. D_{\max} jest maksymalną odległością, dla której infiltracja wody daje zawartości wilgoci powyżej wielkości krytycznej, D_{\max} jest charakterystyczna dla każdego gatunku drewna i określa się ją doświadczalnie. Wskaźnik jest normalizowany, tak aby dawał wartości zawarte w zakresie 0 do 100.

7. Co-ordination of Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in Europe

(prof. Vicente Cortés Corberán, doc. dr hab. Bogdan Sulikowski)
Projekt EU 6th FP NMP2-CT-2004-505834 CONCORDE
(CA) [2004-2006]



Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN jest wykonawcą projektu Unii Europejskiej, przewidzianego do realizacji w czasie 27 miesięcy (2004-2006). Celem projektu jest koordynacja aktywności badawczo-rozwojowej wiodących europejskich laboratoriów pracujących z nanostrukturalnymi tlenkami metali o właściwościach redoksowych, a także innych wielofunkcyjnych materiałów, które są efektywnymi katalizatorami procesów chemicznych mających na celu ochronę środowiska naturalnego i równomierny rozwój. Konsorcjum składa się z 42 partnerów (w tym 7 przemysłowych; trzech partnerów należy do grupy przedsiębiorstw małych lub średnich) pochodzących z 16 krajów europejskich i obejmuje uzupełniające się doświadczenia pokrywające cały obszar badawczy w katalizie, począwszy od badań podstawowych (teoria, zaawansowane syntezy i techniki instrumentalne, badania mechanizmów reakcji), a skończywszy na zastosowaniach praktycznych w wielu dziedzinach (projektowanie reaktorów, kontrola procesów, studia żywotności katalizatora itp.).

W 2005 roku w ramach projektu odbyły się następujące posiedzenia Komitetu Sterującego: 25.01 w Louvain-la-Neuve, 27.02-1.03 w Berlinie, 28.08 w Sofii i 16.11 w Krakowie. W trakcie spotkań omawiano bieżące zagadnienia wynikające z realizacji projektu, dyskutowano dalsze plany dot. projektu (wymiana osób, próbek, „biała księga”, współpraca i koordynacja planów w obrębie pięciu podtematów). Podtematy kierowane są przez następujące osoby: V. Rives (USAL), B. Weckhuysen (UU), A. Brückner (ACA), X. Verykios (UPATRAS) i A. Lemonidou (CERTH). Wypełniono ankiety przygotowane przez prof. Hodnett’a.

W 2005 roku w ramach wymiany osobowej związanej z projektem wzięły udział następujące osoby z IKiFP: mgr K. Samson, dr A. Klisińska-po 2 tygodnie w Madrycie (kataliza, spektroskopia Ramana); mgr U. Filek-2 tygodnie w Berlinie i 3 tygodnie w Bukareszcie (pomiar *in situ*, UV-vis, Raman, EPR); mgr Ł. Mokrzycki-3 tygodnie w Utrechcie (XRD, XRF, IR). Wyjazdy były związane z wykonywaniem badań katalizatorów tlenkowych i zeolitowych. W wyjazdach wzięli udział pracownicy z tytułami doktora, jak i doktoranci instytutu. Projekt ma bowiem istotny aspekt pedagogiczny.

W 2005 w Louvain-la-Neuve odbyła się: 1st Conference of CONCORDE “Understanding the dynamic and transient behaviour of oxide catalysts in working conditions and the relationships with their catalytic performances”, Belgium, January 26-28. Wzięło w niej udział ok. 100 naukowców, w tym pięć osób z IKiFP PAN.

Ze środków projektu dofinansowano ponadto udział kilku osób w konferencji naukowej EuropaCat-VII w Sofii (28.08-2.09.2005). W dniach 17-19 listopada IKiFP PAN zorganizował międzynarodową konferencję ”Catalysis on oxide-type materials. Theory and experiment: share needs and capabilities”.

Obecnie przygotowywane są: (a) 4 Warsztaty CONCORDE, które odbędą się w Krakowie 24-25.02.2006, (b) konferencja w Salonikach 26-28.01.2006, oraz (c) ostatnia konferencja kończąca projekt CONCORDE w maju 2006 w Sewilli.

8. ERA-NET for Applied Catalysis in Europe



(prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Projekt EU 6th FP ERAC 011784 ACENET (CA) [2004-2008]

Projekt ACENET jest projektem typu ERA-NET, który ma na celu współpracę i koordynację działań związanych z badaniami, które są podejmowane na poziomie krajowym i regionalnym przez kraje członkowskie UE i kraje stowarzyszone. Projekty takie pozwalają na tworzenie sieci współpracy i otwieranie swoich programów badawczych dla innych krajów. W projekcie bierze udział 10 partnerów z 9 krajów: Netherlands Organisation for Scientific Research, Holandia; Bundesministerium fuer Bildung und Forschung, Niemcy; Centre National de la Recherche Scientifique, Francja; Ministerstwo Edukacji i Nauki, Polska; Fundacao para a Ciencia e a Tecnologia, Portugalia; Ministero dell'Istruzione della Universita e della Ricerca i Consorzio Reattivita e Catalisi, Włochy; General Secretariat for Research & Technology, Ministry of Development, Grecja; Ministerio de Educacion y Tecnologa, Hiszpania; Forschungszentrum Juelich GmbH, Niemcy; Engineering and Physical Sciences Research Council, Anglia. Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN reprezentuje w ramach projektu Ministerstwo Edukacji i Nauki, ponieważ projekt dotyczy dziedziny katalizy stosowanej. Projekt rozpoczął się 01.09.2004 i będzie trwał do 30.08.2008.

W ramach projektu planuje się ogłosić wspólny konkurs projektów badawczych w dziedzinie katalizy stosowanej, który objąłby obszary priorytetowe zdefiniowane w strategicznej agendzie badawczej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii. Partnerzy uważają, że należy szybko sformułować wspólny program, dzięki któremu będzie można ogłosić konkurs w 2007 roku. Zostały, więc dokładnie przeanalizowane obowiązki, uprawnienia, procedury decyzyjne, sposoby pracy etc. wszystkich uczestników. Szczególnie ważne było dogłębne zrozumienie różnic pomiędzy partnerami. Prace grupy roboczej rozpoczęło stworzenie kwestionariusza, który umożliwił uzyskanie wszystkich informacji od partnerów. Uzyskano informacje dotyczące kwot przeznaczanych na katalizę stosowaną we wszystkich instytucjach, rodzajów procedur aplikacyjnych, priorytetów, strategii i sposobów ich opracowywania oraz ciał decyzyjnych. Partnerzy przekazali również informacje dotyczące rozpoczynania, definiowania i ustanawiania programów badawczych, roli przemysłu, kryteriów przyznawania pieniędzy, możliwości przeznaczania wydatków dla zagranicznych instytucji/naukowców oraz możliwości wspólnego finansowania programów międzynarodowych. Zebrano również informacje dotyczące różnych programów, w ramach których finansuje się projekty badawcze. Każdy program został dokładnie opisany pod kątem: jego celów, wielkości środków finansowych, kwalifikowalności wydatków, możliwych beneficjentów końcowych, drogi obiegu wniosku, zawartości wniosków, procesu oceny wniosków, sposobu wyboru wniosków do finansowania, oceny procesu wdrażania projektów i jego wyników. Na podstawie otrzymanych informacji ustalono dobre praktyki i wybrano wzorcowe kroki proceduralne, które będą używane przy zarządzaniu 'studiami przypadku', które zostaną przeprowadzone w późniejszym etapie.

Niezależnie od prób otworzenia wspólnego konkursu wniosków celem projektu jest stworzenie ram dla Wspólnego Programu Szkoleń i Edukacji. Główną częścią Programu będzie Zintegrowany Kurs w dziedzinie Katalizy. Kurs będzie mógł być organizowany na różne sposoby w różnych krajach. Posiadać będzie jednak wspólny obowiązkowy program naukowy oraz egzamin w języku angielskim. Na podstawie egzaminu będzie można wyłonić kilkunastu najlepszych studentów, którzy wezmą udział w Edukacyjnym Centrum Doskonałości w dziedzinie Katalizy. Poza tym Program przewiduje istnienie szkoły w dziedzinie katalizy stosowanej i kursy Ustawicznego Szkolenia Zawodowego, które zostaną zorganizowane według doświadczeń instytucji angielskich.

9. Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production



(*prof. dr hab. Małgorzata Witko*)

Projekt EU 6th FP NMP2-011730-2 IDECAT (NoE) [2005-2008]

Projekt IDECAT jest projektem typu Sieć Doskonałości (Network of Excellence), który ma na celu wzmocnienie badań w dziedzinie katalizy przez stworzenie ram dla badań, know-how i edukacji pomiędzy różnymi środowiskami katalitycznymi (kataliza heterogeniczna, homogeniczna i biokataliza). Potwierdzeniem osiągnięcia tego celu będzie osiągnięcie trwałej integracji pomiędzy najważniejszymi instytucjami europejskimi działającymi w tej dziedzinie. Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN jest jednym z 17 partnerów projektu koordynowanego przez Departament Chemii Przemysłowej i Inżynierii Materiałowej Uniwersytetu w Mesynie we Włoszech. Partnerami projektu jest 37 laboratoriów z 17 instytucji: Consorzio Interuniversitario per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, Włochy; Ghent University, Belgia; Katholieke University Leuven, Belgia; J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Czechy; Helsinki University of Technology, Finlandia; Centre Nationale de la Recherche Scientifique, Francja; Max-Planck-Gesellschaft, Niemcy; Leibnitz Institute of Organic Catalysis, Niemcy; Technische University Munchen, Niemcy; Consiglio Nazionale delle Ricerche, Włochy; NRSC-Catalysis, Holandia; Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni, Polska; Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, Hiszpania; Stockholm University, Szwecja; University St. Andrews, Anglia; University of Southampton, Anglia; Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Szwajcaria. Projekt rozpoczął się 01. 04. 2004 i będzie trwał do 31. 03. 2009 roku.

Zebranie oficjalnie rozpoczynające projekt odbyło się 15 lipca 2005 roku we Florencji. W czasie zebrania kierownicy wszystkich 13 Pakietów Zadań przedstawili plan pracy na najbliższy rok. Pakiety dzielą się 4 grupy zadań: Wspólny Program Integracji, Wspólny Program Badań, Wspólny Program Rozpowszechniania Wiedzy i Zarządzanie.

Wspólny Program Integracji zakłada stworzenie struktury prawnej i narzędzi Internetowych pozwalających na integrację zespołów biorących udział w projekcie, umożliwienie wzajemnego korzystania z aparatury i najlepszych praktyk oraz kształcenie i mobilność członków sieci. Celem kończącym te wysiłki będzie powstanie wirtualnego Europejskiego Instytutu Badawczego w dziedzinie Katalizy. Instytut Katalizy kieruje Pakietem Zadań dotyczącym narzędzi Internetowych. W ramach Pakietu powstaje w Instytucie strona internetowa projektu. Pracownicy Instytutu wzięli również udział w kilku konferencjach zorganizowanych w ramach projektu.

Wspólny Program Badań zakłada podjęcie czterech zadań badawczych: 1) tworzenie i udoskonalenie nanoobjektów oraz nanoorganizacja, 2) tworzenie i projektowanie nowych wielofunkcyjnych, nanostrukturalnych materiałów, 3) wypełnianie luki w multidyscyplinarnych strategiach badawczych, 4) procesy ochrony środowiska i zrównowazona energia i produkcja. Powyższe zadania dotyczą tematów badawczych podejmowanych przez kilka zespołów Instytutu. Zespoły te podjęły próby nawiązania kontaktów z innymi partnerami projektu w celu ustalenia wspólnych tematów badawczych możliwych do realizacji w ramach projektu.

Wspólny Program Rozpowszechniania Wiedzy zakłada dwa kierunki działań. Pierwszy dotyczy nowych form kształcenia takich jak e-learning, czy między-instytucjonalne studia doktoranckie. Drugi przewiduje upowszechnianie wiedzy o katalizie społeczeństwu. W ramach tego drugiego aspektu działalności w Instytucie Katalizy odbyły się Dni Otwarte.

INNE PROJEKTY BADAWCZE UE

1. Katalityczne oczyszczanie gazów z chlorowcopochodnych węglowodorów

(dr Tadeusz Machej, prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska, mgr Janusz Janas, mgr inż. Robert Janik, dr Halina Piekarska-Sadowska, mgr inż. Wojciech Włodarczyk)
Projekt badawczy EU EUREKA E! 3454 CHLORCAT

W realizacji projektu współpracują 4 jednostki: „Katalizator” Sp. z o.o. i Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN z Polski oraz „Elcom Ekotechnika” s.r.o. i Vysoka Škola Chemicko-Technologicka z Republiki Czeskiej, co jest wynikiem wieloletnich wzajemnych relacji w dziedzinie ochrony środowiska.

Chlorowcopochodne węglowodorów można usuwać na drodze termicznego spalania w temperaturze 1000-1200°C, co wymaga wysokiego nakładu energii i może powodować powstawanie dioksyn. Użycie katalizatora stanowi lepsze technologiczne podejście do tego problemu. Katalizator umożliwi przemianę tych związków do nieszkodliwych produktów, tj. dwutlenku węgla i wody, a powstający HCl będzie usuwany w skruberze. Katalizator musi być odporny na deaktywację pod wpływem HCl. W zależności od zastosowania katalizator będzie miał formę monolitu (plastra miodu) lub kulek.

Celem projektu jest opracowanie technologii wytwarzania katalizatora do pełnego utleniania chlorowcopochodnych węglowodorów. Katalizator został opracowany w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w skali laboratoryjnej. Metoda jego preparatyki jest przedmiotem dwóch zgłoszeń patentowych (P-362181 i P-362182). Pallad, stanowiący aktywny składnik katalizatora jest osadzany na powierzchni naturalnego montmorylonitu modyfikowanego tytanem.

Obecne badania są skoncentrowane na przeniesieniu technologii ze skali laboratoryjnej na przemysłową.

Montmorylonitem stosowanym w tych badaniach był wymieniony sodem naturalny bentonit z Milowic (Na-mt), frakcja o rozmiarach cząstek $< 2\mu\text{m}$. Podpierzana tytanem glina została spreparowana przez dodanie roztworu TiCl_4 i HCl (6 mmol Ti^{4+} / 1 g Na-mt) do wodnej suspensji zawierającej około 14 g/l bentonitu. Mieszaninę pozostawiono do zestarzenia w ciągu 5 godzin w temperaturze 293 K, przy stałym mieszaniu. Powstały materiał został odwirowany, przemyty do zaniku wolnych jonów chlorkowych i wysuszony w temperaturze 363 K.

Wysuszony bentonit wymieniony tytanem dodano do wodnej zawiesiny $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ i mieszano stale przez 15 godzin. Monolit z kordierytu, w formie plastra miodu, zanurzono w spreparowanej zawieszynie, w celu naniesienia warstwy pośredniej. Nadmiar zawiesiny usunięto za pomocą sprężonego powietrza. Monolit suszono w temperaturze 373 K i prażono w temperaturze 773 K. Tak przygotowany monolit zostanie zaimpregnowany roztworem azotanu palladu, a aktywność otrzymanego katalizatora zostanie sprawdzona w instalacji pilotowej w następnym etapie badań.

**PROJEKTY
FUNDUSZY STRUKTURALNYCH UE**

1. Wdrożenie technologii cementu romańskiego do praktycznej konserwacji zabytków

(doc. dr hab. Roman Kozłowski, dr Grzegorz Adamski, dr Łukasz Bratasz, dr Antonina Kozłowska, dr Dariusz Mucha, mgr inż. Renata Vyskocilova)
Projekt Sektorowego Programu Operacyjnego - Wzrost Konkurencyjności Przedsiębiorstw WKP_1/1.4.1/1/2005/8/8/222/2005/U

Celem projektu jest wprowadzenie do praktyki konserwatorskiej nowych materiałów zgodnych z oryginalnie stosowanymi w okresie XIX i początku XX wieku zaprawami opartymi na cementach romańskich. Umożliwi to właściwą konserwację ogromnego zasobu zabytków architektury miejskiej z tego okresu. Projekt jest realizowany przez konsorcjum utworzone przez przedsiębiorstwo konserwatorskie AC Konserwacja Zabytków Piotrowski, Kosakowski Spółka Jawna i Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN.

Głównym zadaniem badawczym zrealizowanym w okresie sprawozdawczym było przygotowanie cementów romańskich o zróżnicowanych właściwościach użytkowych takich jak: czas wiązania, kolor i wczesna wytrzymałość mechaniczna. Przeprowadzono wypały dla dwóch różnych surowców – margli wapiennych o odpowiednim składzie chemicznym – pozyskanych z kamieniołomów w Folwarku w Polsce i w Lilienfeld w Austrii. Wypały prowadzono w dużym piecu elektrycznym o wielkości wsadu surowca wynoszącej 300 kg. W czasie wypałów różnicowano temperaturę i czas w zakresie 830-1060°C i 300-1500 minut. Przebadano skład fazowy otrzymanych cementów metodą dyfrakcji rentgenowskiej. Stwierdzono przydatność posiadanego surowca do wytwarzania wysokiej jakości cementu romańskiego poprzez wypał w relatywnie szerokim zakresie temperatur i czasu. Opracowano metodę szybkiej oceny zdolności cementów do osiągnięcia wczesnej wytrzymałości mechanicznej po zarobieniu z wodą przez oznaczenie metodą dyfrakcji rentgenowskiej zawartości uwodnionych faz glinianowych, odpowiedzialnych za tę wytrzymałość. Stwierdzono, że czas wiązania zależy w niewielkim stopniu od parametrów wypału. Czas ten jest bardzo krótki i wynosi od 30 do 120 sekund. W związku z tym przebadano szereg metod zwiększania czasu wiązania. Metodą optymalną okazał się dodatek kwasu cytrynowego w ilości 0.4% w przeliczeniu na masę suchego cementu.

Wytworzone cementy i informacje recepturowe przekazano partnerowi konserwatorskiemu do prób i badań praktycznych.

**POLSKO-UKRAIŃSKIE
LABORATORIUM KATALIZY**

1. Utlenianie n-pentanu

(dr Jerzy Stoch)

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni, PAN, Kraków

(prof. Valery A. Zazhigalov)

Instytut Sorpcji i Podstaw Endoekologii, NANU, Kijów

Przeprowadzono badania wpływu na katalizator VPO różniących się swą naturą domieszek (W, Mo, Bi, Zr, Ti, La, Fe, Te) dodanych w różnych ilościach. Wykazano, że wszystkie domieszki zwiększają stosunek P/V na powierzchni, co zmienia kwasowość powierzchni, jednak nie Brønsteda, lecz Lewisa. Wykazano, że rolę dodatkowych centrów Lewisa mogą odgrywać jony domieszek metali, które wystarczająco jednorodnie rozmieszczają się na powierzchni nośnika (SEM i EDXRS). Przy użyciu spektrometru masowego wykonano dokładną analizę produktów utlenienia n-pentanu i butenu-1 na katalizatorze VPO domieszkowanym Mo i Bi. Skład produktów utlenienia n-pentanu potwierdził wcześniejsze nasze przewidywania mechanizmu powstawania bezwodnika ftalowego. Niska stacjonarna zawartość powstającego bezwodnika ftalowego wiąże się z wysoką szybkością przekształcania butenu w bezwodnik maleinowy. Wzrost kwasowości Lewisa stabilizuje olefinę na powierzchni katalizatora i zwiększa zawartość bezwodnika ftalowego w produktach reakcji.

2. Utlenienie CO na katalizatorach Co naniesionych na węgiel

(dr Jerzy Stoch)

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni, PAN, Kraków

(prof. Valery A. Zazhigalov)

Instytut Sorpcji i Podstaw Endoekologii, NANU, Kijów

Wykazano, że naniesienie kobaltu na aktywowany węgiel istotnie wpływa na aktywność w utlenieniu CO. Opracowano wytwarzanie nanometrycznych cząstek związku kobaltu na powierzchni węgla. Wstępna redukcja powierzchni wodorem o ponad 100°C obniża temperaturę 100% konwersji oraz silnie zwiększa aktywność tych katalizatorów. Również wprowadzenie azotu na powierzchnię aktywowanego węgla jeszcze więcej zwiększa aktywność. Na takich katalizatorach 100% konwersji osiąga się w 50°C. Stwierdzono, że selektywność procesu nie zmniejsza się w wyniku wprowadzenia nadmiaru wodoru (do 70% obj.) do mieszaniny reakcyjnej, co czyni badane katalizatory obiecującymi w zastosowaniu do oczyszczania wodoru dla ogniw paliwowych.

3. Mechanochemiczne przygotowanie katalizatorów tlenkowych

(dr Jerzy Stoch)

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni, PAN, Kraków

(prof. Valery A. Zazhigalov)

Instytut Sorpcji i Podstaw Endoekologii, NANU, Kijów

Wykazano, że obróbka mechanochemiczna katalizatorów V-Cr-O praktycznie nie odbija się na ich aktywności w reakcji utlenienia CO. Jednak w reakcji utleniającego odwodornienia propanu po obróbce mechanochemicznej w etanolu wykazują wysoką aktywność i selektywność względem propylenu, w porównaniu z preparatami nie poddanymi takiej obróbce lub poddanymi w wodzie.

Stwierdzono, że po obróbce mechanochemicznej trzech tlenków: V, Mo i Zr, jest możliwe otrzymanie katalizatorów aktywnych w utleniającym odwodornieniu etanu. Zastosowanie takiego katalizatora do utlenienia propanu w mieszaninach gazowych z niedoborem tlenu, w procesie pojawia się molekularny wodór.

W wyniku obróbki mechanochemicznej mieszanin zmienia się struktura podstawowej fazy wanadowo-fosforowej i powstaje pirofosforan cyrkonu, natomiast molibden pozostaje w postaci tlenku

WSPÓŁPRACA Z INNYMI INSTYTUCJAMI I PRZEMYSŁEM W ROKU 2005

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

W szczególności wyróżnić należy dwa kierunki prac aplikacyjnych Instytutu:

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

1. Katalityczne oczyszczanie przemysłowych gazów odlotowych

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

Prace te ukierunkowane są na:

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

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

We współpracy z Przedsiębiorstwem Usług Budownictwa i Ochrony Środowiska "Eko-Dom" w Łomży i Grajewie w roku 2005 prowadzony był nadzór autorski nad nowo uruchamianymi i eksploatowanymi instalacjami "Swingtherm". Polegał on na modernizacji niektórych z urządzeń oraz na ocenie sprawności i aktywności użytkowanych katalizatorów. Przeprowadzono m.in. następujące prace w celu określenia rodzajów zanieczyszczeń i jakości działania eksploatowanych urządzeń i katalizatorów:

- pomiary stężenia styrenu w wybranych punktach hali stateczników HID na terenie zakładów Philips Lighting- Farel Mazury Sp. z o.o.

Przeprowadzono też szereg badań dla innych podmiotów gospodarczych, w których Instytut rozwiązuje problemy związane z oczyszczaniem gazów produkcyjnych emitowanych do atmosfery:

- dla Zakładu Urządzeń Technologicznych "Sumech" wykonano analizę stopnia oczyszczania powietrza przez dopalacz gazowo-katalityczny oczyszczający gazy odlotowe z drukarki Schiavi w Zakładach "Alupol" w Tychach
- dla firmy "Alutech" Sp. z o.o. przeprowadzono badania skuteczności działania katalizatorów (3 próbki)
- dla Zakładów Wyrobów Powlekanych "Sanwil" S.A. w Przemysłu przeprowadzono badania zawartości lotnych związków organicznych w próbkach papieru zużytego w procesie produkcyjnym
- dla Fabryki Osłonek Białkowych "Fabios" w Białce k. Makowa Podhalańskiego wykonano badania aktywności i analiza działania katalizatora w zakresie redukcji CO

i NO_x oraz w oparciu o te badania opracowano koncepcję obniżenia emisji tlenków azotu i tlenku węgla

- dla firmy "Lobbe" Sp. z o.o. w Dąbrowie Górniczej przeprowadzono określenie aktywności dostarczonego katalizatora monolitycznego w reakcji SCR tlenków azotu amoniakiem w funkcji temperatury, stężenia reagentów i obciążenia katalizatora
- dla Zakładów Azotowych "Puławy" S.A. wykonano badania fizykochemiczne i określenie aktywności katalitycznej próbek katalizatora wanadowego

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

2. Zapobieganie niszczącemu działaniu zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe

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

W 2005 roku wykonano m.in. następujące ekspertyzy:

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

DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2005

PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM

KSIĄŻKI I PODRĘCZNIKI

1. A. Bielański "Podstawy Chemii Nieorganicznej (Fundamentals of Inorganic Chemistry)", Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2002, wydanie V, dodruk 2005 [ISBN 83-01-13815-7]
2. B. Grzybowska-Świerkosz "Heterogeneous Catalysis: Fundamentals, Catalysts and Mechanisms of Main Reactions. Lecture Notes for Students of International Postgraduate School", IkiFP PAN, Kraków 2005, p.1-192 [ISBN 83-920331-5-9]

PRACE PRZEGLĄDOWE I ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH

1. Z. Adameczyk, K. Jaszczółt, A. Michna, B. Siwek, L. Szyk-Warszyńska, M. Zembala "Irreversible Adsorption of Particles on Heterogeneous Surfaces", Adv. Colloid Interface Sci., 118 (2005) 25-42
2. J. Haber "Selective Oxidation – Heterogeneous", in: "Encyclopedia of Catalysis" (ed. I. T. Horvath), Wiley-Interscience, New York 2005, vol.6 p.141-189 [ISBN 0-471-24183-0]
3. G. Popov, A. V. Smirnov, J. Kryściak, M. Derewiński, O. V. Borsukov, E. G. Derouane, F. Lemos, F. Fajula, I. Ivanova "Conversion of Gas Condensate over Metal-containing MFI Catalysts", in: "Sustainable Strategies for the Upgrading of Natural Gas: Fundamentals, Challenges, and Opportunities", (eds. E. G. Derouane et al.), NATO ASI Series, II. Mathematics, Physics and Chemistry, vol. 191, Springer, Dordrecht 2005, p.351-357 [ISBN 1-4020-3309-5]
4. P. Weroński "Application of the Extended RSA Models in Studies of Particle Deposition at Partially Covered Surfaces", Adv. Colloid Interface Sci., 118 (2005) 1-24
5. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś "Theoretical Basis of the Activation of Light Alkanes", in: "Sustainable Strategies for the Upgrading of Natural Gas: Fundamentals, Challenges, and Opportunities", (eds. E. G. Derouane et al.), NATO ASI Series, II. Mathematics, Physics and Chemistry, vol. 191, Springer, Dordrecht 2005, p.85-105 [ISBN 1-4020-3309-5]

ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O CYRKULACJI MIĘDZYNARODOWEJ

1. Z. Adameczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek "Irreversible Adsorption of Particles on Heterogeneous Surfaces", Appl. Surf. Sci., 252 (2005) 723-729
2. Z. Adameczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek, P. Weroński "Surface Clusters of Colloid Particles Produced by deposition on Sites", Langmuir, 21 (2005) 8952-8959

3. A. Bielański, A. Lubańska, A. Micek-Ilnicka, J. Poźniczek "Polyoxometallates in Acid-base Catalysis", *Coordination Chem. Rev.*, 249 (2005) 2222-2231
4. T. T. Biswick, W. Jones, A. Pacuła, E. M. Serwicka "Synthesis, Characterization and Anion Exchange Properties of Copper, Magnesium, Zinc and Nickel Hydroxy Nitrates", *J. Solid State Chem.*, 178 (2005) 3810-3816
5. Ł. Bratasz, R. Kozłowski "Laser Sensors for Continuous in-situ Monitoring of the Dimensional Response of Wooden Objects", *Studies in Conservation*, 4 (2005)
6. E. Brocławik, A. Góra, P. Liguziński, P. Petelenz, M. Slawik "Quantum Chemical Modelling of the Process of Lithium Insertion into WO₃ Films", *Catal. Today*, 101-102 (2005) 155-162
7. E. Brocławik, P. Kozyra, J. Datka "IR Studies and DFT Quantum Chemical Calculations Concerning Interaction of Some Organic Molecules with Cu⁺ Sites in Zeolites", *Compt. Rend. Chim.*, 8 (2005) 491-508
8. O. Demoulin, I. Seunier, F. Dury, M. Navez, R. Rachwalik, B. Sulikowski, S. R. Gonzalez-Carrazan, E. M. Gaigneaux, P. Ruiz "Modulation of Selective Sites by Introduction of N₂O, CO₂ and H₂ as Gas Promoters into the Feed during Oxidation Reactions", *Catal. Today*, 99 (2005) 217
9. M. Elanany, M. Koyama, M. Kubo, E. Brocławik, A. Miyamoto "Periodic Density Functional Investigation of Lewis Acidic Sites in Zeolites: Relative Strength Order as Revealed from NH₃ Adsorption", *Appl. Surf. Sci.*, 246 (2005) 96-101
10. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Mechanism of Actin Polymerisation by Myosin Subfragment-1 Probed by Dynamic Light Scattering", *Bioelectrochemistry 2005- Special Issues BES-ISE-54*
11. B. Gil, J. Datka, A. Kubacka, J. Janas, B. Sulikowski "NO Adsorption on the Active Sites of Co- and/or In-Containing Ferrierite Catalysts for the CH₄-SCR-NO Process", *Stud. Surf. Sci. Catal.* 158B (2005) 1137-1144
12. K. Góra-Marek, M. Derewiński, P. Sarv, J. Datka "IR and NMR Studies of Mesoporous Alumina and Related Aluminosilicates", *Catal. Today*, 101 (2005) 131-138
13. R. Grabowski, J. Słoczyński "Kinetics of Oxidative Dehydrogenation of Propane and Ethane on VO_x/SiO₂ Pure and with Potassium Additive", *Chem. Eng. Proc.*, 44 (2005) 1082
14. J. Groszek, E. Lalik, J. Haber "Heats of Displacement of Hydrogen from Palladium by Noble Gases", *Appl. Surface Sci.*, 252 (2005) 654
15. J. Haber, L. Matachowski, D. Mucha, J. Stoch, P. Sarv "New Evidence on the Structure of Potassium Salt of 12-Tungstophosphoric Acid K_xH_{3-x}PW₁₂O₄₀", *Inorg. Chem.*, 44 (2005) 6695-6703

16. B. Handke, A. Kozłowski, K. Parliński, J. Przewoźnik, T. Ślęzak, A. I. Chumakov, L. Niesen, Z. Kąkol, J. Korecki "Experimental and Theoretical Studies of Vibrational Density of States in Fe₃O₄ Single Crystalline Thin Film", *Phys. Rev. B*, 71 (2005) 144301
17. J. Handzlik, J. Ogonowski, J. Stoch, M. Mikołajczyk "Comparison of Metathesis Activity of Catalysts Prepared by Anchoring of MoO₂(acac)(2) on Various Supports", *Catal Lett.*, 101 (2005) 65-69
18. J. Handzlik, J. Ogonowski, R. Tokarz-Sobieraj "Dependence of Metathesis Activity of Mo-Methylidene Sites on Their Localisation on (100) γ-Al₂O₃ – a Theoretical Study", *Catal. Today*, 101 (2005) 163-173
19. V. M. Jovanović, D. Tripković, A. Tripković, A. Kowal, J. Stoch "Oxidation of Formic Acid on Platinum Electrodeposited on Polished and Oxidized Glassy Carbon", *Electrochem. Commun.*, 7 (2005) 1039-1044
20. D. Kmieć, B. Sepioł, M. Sladeczek, G. Vogl, J. Korecki, T. Ślęzak, R. Ruffer, K. Vanormelingen, A. Vantomme "Iron Diffusion Near Surface of Fe₃Si is Fast and Decays to Bulk Values Within 3 nm", *Defect and Diffusion Forum*, 237-240 (2005) 1222
21. M. Kolasińska, P. Warszyński "Effect of Support Material and Conditioning on Wettability of PAH/PSS Multilayer Films", *Bioelectrochem.*, 66 (2005) 65-70
22. M. Kolasińska, P. Warszyński "The Effect of the Nature of Polyions and Treatment after Deposition on Wetting Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers", *Appl. Surface Sci.*, 252 (2005) 759-765
23. Kubacka, J. Janas, E. Włoch, B. Sulikowski "Selective Catalytic Reduction of Nitric Oxide Over Zeolite Catalysts in the Presence of Hydrocarbons and the Excess of Oxygen", *Catal. Today*, 101 (2005) 139-145.
24. E. Lalik "Shannon Information as a Measure of Distortion in Coordination Polyhedra", *J. Applied Cryst.*, 38 (2005) 152
25. J. Lović, A. Tripković, S. Gojković, K. Popović, D. Tripković, P. Olszewski, A. Kowal, "Kinetic Study of Formic Acid Oxidation on Carbon-supported Platinum Electrocatalyst", *J. Electroanal. Chem.*, 581 (2005) 294-302
26. K. Łątka, J. Gurgul, R. Kmieć, A. W. Pacyna, W. Chajec "¹¹⁹Sn Mössbauer Studies of the DyAgSn and DyAuSn Compounds", *J. Alloys Comp.*, 390 (2005) 9-15
27. K. Łątka, J. Gurgul, R. Kmieć, A. W. Pacyna, W. Chajec "Hyperfine Interactions Studied by ¹¹⁹Sn Mössbauer Spectroscopy in TbAuSn and TmAuSn Compounds", *J. Alloys Comp.*, 400 (2005) 16-22
28. K. Łątka, R. Kmieć, J. Gurgul, M. Rams, A. W. Pacyna, T. Schmidt, R. Pöttgen "Structure, Magnetic Properties and ¹¹⁹Sn Mössbauer Spectroscopy of PrRhSn", *J. Solid State Chem.*, 178 (2005) 3101-3109

29. J. Łojewska, A. Kołodziej, J. Żak, J. Stoch "Pd/Pt Promoted Co_3O_4 Catalysts for VOCs Combustion Preparation of Active Catalyst on Metallic Carrier", *Catal. Today*, 105 (2005) 655-661
30. K. Małyś, M. Krasowska, M. Krzan "Influence of Surface Active Substances on Bubble Motion and Collision with Various Interfaces", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 114-115C (2005) 205-205
31. T. Pańczyk "The Influence of a Small Amount of Active Sites on the Adsorption Kinetics of Nitrogen on Ruthenium", *Appl Surf. Sci.*, 252 (2005) 687-698
32. T. Pańczyk, W. Gac, M. Pańczyk, A. Dominko, T. Borowiecki, W. Rudziński, "Thermodesorption Studies of Energetic Properties of Ni/MgO- Al_2O_3 Catalysts. Determination of Adsorption Energy Distribution Functions", *Langmuir*, 21 (2005) 7311-7320
33. T. Pańczyk, W. Rudziński "On the Ways of Generalization of Adsorption Kinetic Equations for the Case of Energetically Heterogeneous Surfaces", *Appl. Surf. Sci.*, 252 (2005) 678-686
34. T. Pańczyk, P. Szabelski, W. Rudziński "Hydrogen Adsorption on Nickel (100) Single Crystal Face. A Monte Carlo Study of The Equilibrium and Kinetics", *J. Phys. Chem. B*, 109 (2005) 10986-10994
35. T. Pańczyk, F. Villieras "Monte Carlo Simulations of Controlled Rate Thermal Analysis Spectra - The Influence of Surface Energetic Heterogeneity and Lateral Interactions between Adsorbed Molecules", *Appl. Surf. Sci.*, 239 (2005) 353-366
36. G. Para, E. Jarek, P. Warszyński "The Surface Tension of Aqueous Solution of Cetyltrimethylammonium Cationic Surfactants in Presence of Bromide and Chloride Counterions", *Colloid Surf. A*, 261 (2005) 65-73
37. J. Poltowicz, E. Tabor, K. Pamin, J. Haber "Effect of Substituents in the Manganese μ -Oxo Porphyrins Catalyzed Oxidation of Cyclooctane with Molecular Oxygen", *Inorg. Chem. Commun.*, 8 (2005) 1125-1127
38. J. Poźniczek, A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska, A. Bielański "Catalytic Synthesis of Ethyl-tert-butyl Ether on Dawson Type Heteropolyacid", *Appl. Catal. A*, 286 (2005) 52-60
39. R. Rachwałik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Dealumination of Ferrierite Type Zeolite: Physicochemical and Catalytic Properties", *Catal. Today*, 101 (2005) 147
40. S. A. Rajjak, E. Broclawik, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, A. Miyamoto "Hyperconjugation with Lone Pair of Morpholine Nitrogen Stabilizes Transition State for Arene Hydroxylation in CYP3A4 Metabolism of (S)-N-[1-(3-morpholin-4-yl phenyl)ethyl]-3-phenylacrylamide", *Chem. Phys. Lett.*, 419 (2005) 523-527

41. J. Rodakiewicz-Nowak, M. Ito "Effect of AOT on Enzymatic Activity of the Organic Solvent Resistant Tyrosinase from *Streptomyces sp.* REN-21 in Aqueous Solutions and Water-in-Oil Microemulsions", *J. Colloid Interface Sci.*, 284 (2005) 674-679
42. J. Rodakiewicz-Nowak, P. Nowak, D. Rutkowska-Żbik, M. Ptaszek, O. Michalski, G. Mynarczuk, J. Eilmes "Spectral and Electrochemical Characterization of Dibenzotetraaza[14]annulenes", *Supramolecular Chem.*, 17 (2005) 643-647
43. J. Rodakiewicz-Nowak, N. N. Pozdnyakova, O. V. Turkovskaya "Water-in-Oil Microemulsions as the Reaction Medium for the Solvent –Sensitive Yellow Laccases", *Biocatalysis Biotransformation*, 23 (2005) 271-280
44. W. Rudziński, T. Pańczyk, W. Płaziński "Kinetics of Isothermal Gas Adsorption on Heterogeneous Solid Surfaces: Equations Based on Generalization of the Statistical Rate Theory of Interfacial Transport", *J. Phys. Chem. B*, 109 (2005) 21868-21878
45. W. Rudziński, M. Witko "Fifth International Symposium - Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids - ISSHAC-V, Gdansk, Poland, - 30th August 3rd September 2004", *Appl. Surf. Sci.* 252 (2005) 501-504
46. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Gąsior, K. Samson, I. Gressel, J. Stoch "Effect of Au in V₂O₅/SiO₂ and MoO₃/SiO₂ Catalysts on Physicochemical and Catalytic Properties in Oxidation of C₃ Hydrocarbons and of CO", *Catal. Today*, 99 (2005) 151-159
47. P. Sarv, M. Derewiński, I. Heinmaa "Active Site Reinsertion and Redistribution in B,Al-Beta Zeolite Effected by Boron Removal", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 158 (2005) 687-694
48. M. Sladeczek, B. Sepioł, D. Kmieć, J. Korecki, T. Ślęzak, R. Ruffer, G. Vogl "Hyperfine Relaxation in an Iron Sub-monolayer", *Defect and Diffusion Forum*, 237-240 (2005) 1225
49. R. P. Socha, J. Fransaer "Mechanism of Formation of Silica-silicate Thin Films on Zinc", *Thin Solid Films*, 488 (2005) 45-55
50. P. Szabelski, T. Pańczyk, W. Rudziński "Theoretical Study of the Influence of Laser-induced Defects on the Adsorption of Gases on Solid Surfaces", *Appl. Surf. Sci.*, 252 (2005) 582-590
51. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, R. Gryboś "DFT Cluster Model Studies on Molybdena and Vanadia Based Catalysts. Energetics of Surface Oxygen Point Defects", *Catal. Today*, 99 (2005) 241-253
52. H. Tsuboi, A. Hasagawa, H. Iga, K. Sasata, T. Masuda, M. Koyama, M. Kubo, E. Broclawik, H. Yabuhara, A. Miyamoto "Tight-binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Study on Depth Profile Prediction in Low Energy Boron Implantation Process", *Japan J. Appl. Phys.*, 44 (2005) 2288-2293

53. W. Turek, J. Haber, A. Krowiak "Dehydration of Isopropyl Alcohol Used as an Indicator of the Type and Strength of Catalyst Acid Centres", *Appl. Surf. Sci.* 252 (2005) 847-855
54. G. Wiegosiński, A. J. Grochowalski, T. Machej, T. Pająk, W. Cwiakalski "Catalytic Destruction of Dioxins on V₂O₅-WO₃/Al₂O₃-TiO₂ Catalyst. Effect of Temperature and Catalyst Loading", *Organohalogen Comp.*, 66 (2005) 2242-2245

ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O OGRANICZONEJ CYRKULACJI I ARTYKUŁY POPULARNO-NAUKOWE

1. M. Bazarnik, M. Zimowska, E. Serwicka, K. Bahranowski, A. Gaweł, Z. Olejniczak "Syntetyczny kanemit jako prekursor mezoporowatych materiałów krzemionkowych", *Przegląd Geologiczny*, 53 (2005) 787
2. A. Bielański "Woda", in: *Wielka Encyklopedia PWN*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2005, vol.29, p.458-460 [ISBN 83-01-14364-9]
3. A. Bielański "Wodór", in: *Wielka Encyklopedia PWN*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2005, vol.29, p.471-472 [ISBN 83-01-14364-9]
4. K. Khristov, M. Krasowska, K. Małysa, D. Exerova "Foams from ABA Triblock Polymers: Liquid Content and Drainage under Dynamic and Static Conditions", *Bulgarian Chem. Commun.*, 37 (2005) 166-172
5. M. Krasowska, K. Małysa "Time Scale of the Three Phase Contact Formation by the Bubble Colliding with Hydrophobic Surface in n-Pentanol and n-Octanol Solutions", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 39 (2005) 21-32
6. A. Stoch, J. Stoch, M. Mikołajczyk, E. Długoń "Silica-titania Nanodeposits Interaction with Dental Alloy Remanium 2000", *Inż. Nanomateriałów*, 8 (2005) 43-53
7. W. Włodarczyk, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, A. Michalik, E. M. Serwicka "Dotowany palladem i/lub chromem, podpierany cyrkonem montmorillonitowy kompozyt jako katalizator w procesach oczyszczania powietrza z chlorowanych węglowodorów alifatycznych", *Przegląd Geologiczny*, 53 (2005)
8. P. Zarzycki, P. Szabelski, W. Piasecki, R. Charnas "Application of Monte Carlo Simulations for the Calculation of Differential Capacitance of Double Electrical Layer Formed at the Metal Oxide/electrolyte Solution Interface", *Annales UMCS, Sectio AA Chemia*, 15 (2005) 230-245

ARTYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Z. Adamczyk "Understanding Hetero System (Adsorption): Can It be Achieved?", in: *Bulletin of CatColl Centre, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces"* (ed. L. Szyk-Warszyńska), IKiFP PAN, Kraków 2005, p. 165-179 [ISBN 83-920331-6-7]

2. Z. Adamczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek "Irreversible Adsorption – Kinetic and Structural Aspects", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.79-85 [ISBN 83-920032-3-3]
3. Z. Adamczyk, A. Michna, P. Warszyński, M. Zembala "Polyelectrolyte Multilayer Probing by Streaming Potential and Particle Deposition Measurements – New Data and New Problems", in: Bulletin of CatColl Centre, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces" (ed. L Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, p. 135-139 [ISBN 83-920331-6-7]
4. W. Barzyk "Electric Surface Potential Study of Orientation Changes in Monolayers at the Air/solution Interface", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.125-130 [ISBN 83-920032-3-3]
5. Ł. Bratasz, S. Jakiela, R. Kozłowski "Allowable Thresholds in Dynamic Changes of Microclimate for Wooden Cultural Objects: Monitoring in-situ and Modelling", in: Preprints., 14th Triennial Meeting ICOM Committee for Conservation, The Hague 2005, James & James, London 2005, vol.2, p.582-589
6. E. Broclawik, K. Chiba, Y. Sasaki, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, K. Akutsu, M. Hirota, M. Kitada, H. Hirata, A. Miyamoto "First-Principles and Tight Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to Vibrationally Excited States Dynamics of Water", Abstr. PAP Am. Chem. Soc., 2005, vol.229: part 1, paper 293-COMP
7. E. Broclawik, A. Rajjak Shaikh, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, A. Miyamoto "Metabolism of Arene Substrates on Iron Site in Cytochrome P450: Quantum Chemical DFT Modeling", in: "Lecture Series on Computer and Computational Science" (ed. T. Simos), 2005, vol.4B, p.1367-1370 [ISBN 90-6764-442-0]
8. C. Dejugnant, G. Para, P. Warszyński "Preparation of PAH/PSS Microcapsules by Membrane Emulsification", in: Bulletin of CatColl Centre, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces" (ed. L Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, p. 225-236 [ISBN 83-920331-6-7]
9. P. Dyshlovenko, P. Warszyński "Numerical Study of Electrostatic Colloidal Interaction at Charged Interface", in: Bulletin of CatColl Centre, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces" (ed. L Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, p. 249-258 [ISBN 83-920331-6-7]
10. S. Dźwigaj, I. Gressel, B. Grzybowska, K. Samson "Oxidative Dehydrogenation of Propane on VSiβ Catalysts", Mater. 12 Forum Zeolitowego, Ciężen 2005, Esus, Poznań 2005, p.145-150 [ISBN 83-232-1506-5]

11. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Mechanism of Actin Polymerization by Myosin Subfragment-1 Probed by Dynamic Light Scattering", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.313-315 [ISBN 83-920032-3-3]
12. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Oxide Catalysts: What We Know, and What We Would Like to Know", in: "Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, CatColl Lecture Notes 4", (eds. P. Hejduk, M. Szalaniec), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.5-24 [ISBN 83-920331-8-3]
13. J. Gurgul, C. Leroux, G. Ghibaudo, J. A. Chroboczek "LF Noise and Tunneling Current in Nanometric SiO₂ layers", Proc. AIP Conf., 780 (2005) 209
14. E. Jarek P. Warszyński "Theoretical Model of Simultaneous Adsorption of Ionic and Nonionic Surfactants and Its Application for Alkanoic Acids", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.149-152 [ISBN 83-920032-3-3]
15. T. Jasiński, P. Warszyński, K. Lunkenheimer "New Model for Description of Adsorption of Non-ionic Surfactants at Fluid Interfaces", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.65-70 [ISBN 83-920032-3-3]
16. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Transformacja mezo- i makroporowatych glinokrzemianów zeolitowych materiały zawierające domeny mikrokystaliczne zeolitu Y", Mater. 12 Forum Zeolitowego, Ciężen 2005, Esus, Poznań 2005, p.51-57 [ISBN 83-232-1506-5]
17. M. Kolasińska, P. Nowak, A. Trybała, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers: Comparison of PAH/PSS and Chitosan/Alginate Systems", in: Bulletin of CatColl Centre, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces" (ed. L. Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, p. 87-96 [ISBN 83-920331-6-7]
18. M. Kolasińska, A. Trybała, P. Warszyński "Ellipsometric Thickness and Wetting Properties of Polyelectrolyte Multilayers", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.541-458 [ISBN 83-920032-3-3]
19. M. Krasowska, K. Małysa "Role of Gas Presence at Hydrophobic Solid Surface in Formation of the Three-phase Contact", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.119-124 [ISBN 83-920032-3-3]
20. M. Krzan, J. Zawała, M. Krasowska, K. Małysa "Bubble Motion as Method of Detection of Organic Contaminations in Water", Proc. 4th Int. Conf. "Oils and Environment" AUZO 2005, Gdańsk 2005, pp.8

21. M. Kubo, Y. Sasaki, K. Chiba, P. Qiang, A. Rajjak, H. Tsuboi, M. Koyama, E. Broclawik, K. Akutsu, M. Hirota, M. Kitada, H. Hirata, A. Miyamoto "Tight Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to the Formation Dynamics of Hydrogen by the Chemical Reactions of Vibrationally Excited Water on Si Surfaces", Abstr. PAP Am. Chem. Soc., 2005, vol.229: part 1, paper 350-COMP
22. S. Ng, P. Warszyński, K. Małysa "Method of Monitoring and Determination of Dimensions and Velocities of Aggregates Rising Inside an Industrial Processing Unit", Proc. 4th Int. Conf. "Oils and Environment" AUZO 2005, Gdańsk 2005, p.106-113
23. G. Para, P. Warszyński, E. Jarek "Hofmeister Series Effect in Adsorption of Cationic Surfactants in the Presence of 1-1 Electrolytes", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.153-156 [ISBN 83-920032-3-3]
24. A. Pomianowski "Open Systems", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.53-58 [ISBN 83-920032-3-3]
25. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Transformacje węglowodorów alkiloaromatycznych na modyfikowanych ferierytach", Mater. 12 Forum Zeolitowego, Ciężen 2005, Esus, Poznań 2005, p.169-170 [ISBN 83-232-1506-5]
26. J. Rodakiewicz-Nowak "Catalytic Activity of Ligninolytic Enzymes in Water in Oil Microemulsions", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.271-275 [ISBN 83-920032-3-3]
27. M. Ruszel, B. Grzybowska, A. Palej, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Oxidation of CO and C₃H₆ on Au/Ti-SBA-15 Catalysts", Mater. 12. Forum Zeolitowego, Ciężen 2005, Esus, Poznań 2005, p.1175-1180 [ISBN 83-232-1506-5]
28. C. Simon, P. Petitjean, J. Beylich, C. Dejugnant, G. Para, P. Warszyński "Preparation of PAH/PSS Microcapsules by Membrane Emulsification", in: Bulletin of CatColl Centre, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces" (ed. L. Szyk-Warszyńska), IKiFP PAN, Kraków 2005, p. 225-236 [ISBN 83-920331-6-7]
29. M. Śladek, B. Sepioł, L.-M. Stadler, D. Kmiec, G. Vogl, J. Korecki, T. Ślęzak "Synchrotron Radiation - a Multifunctional Tool for Studies of Dynamics", Proc. 14th Conf. of Slovak Physicists, Smolenice 2005, (ed. M. Reiffers), Slovak Physical Society 2005, p.55-56 [ISBN 80-969124-1-0]
30. J. Szaleniec, M. Modrzejewski, M. Szaleniec, W. Wszolek "Application of New Acoustic Parameters in ANN-Aided Pathological Speech Diagnosis", Proc. Conf. Speech Analysis, Synthesis and Recognition, Application of Phonetics, Kraków 2005
31. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Deposition of Colloid Particles on Metal Plates", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.87-90 [ISBN 83-920032-3-3]

32. P. Warszyński "Preface – CatColl Centre", in: Bulletin of CatColl Centre of Excellence, Lecture Notes of Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces" (ed. L. Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, p. 7-11 [ISBN 83-920331-6-7]
33. P. Warszyński "Preface CatColl Centre", in: Bulletin of CatColl Centre of Excellence, Lecture Notes 3, (ed. L. Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.4-8 [ISBN 83-920331-3-2]
34. P. Warszyński "Adsorption of Surfactants; Route from Molecular Modeling to Adsorption Isotherms", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.27-34 [ISBN 83-920032-3-3]
35. P. Warszyński, P. Dyshlovenko "Numerical Study of Electrostatic Colloidal Interaction at Interface", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.91-94 [ISBN 83-920032-3-3]
36. J. Zawala, M. Krzan, M. Krasowska, K. Małysa "Inducement of Dynamic Adsorption Structures at Liquid/gas Interface; Acceleration and Velocity of the Detaching Bubble", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.115-118 [ISBN 83-920032-3-3]

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Z. Adamczyk "Understanding Hetero Systems Adsorption: Can It Be Achieved?", Book of Abstracts. Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.34-35 [ISBN 83-920331-4-0]
2. Z. Adamczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek "Nieodwracalna adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.353 [ISBN 83-920331-2-4]
3. Z. Adamczyk, A. Michna, P. Warszyński, M Zembala "Polyelectrolyte Multilayer Probing by Streaming Potential and Particle Deposition Measurements – New Data and New Problems", Book of Abstracts. Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.27-28 [ISBN 83-920331-4-0]
4. Z. Adamczyk, M. Zembala, A. Michna "Characterization of Polyelectrolyte Films by Colloid Particle Deposition and Streaming Potential Methods", Book of Abstracts. 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.238
5. A. Adamski, E. Tabor, Z. Sojka "Transformation of NO_x on Ceria-zirconia Surface in the Presence of Oxygen", Book of Extended Abstracts. Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005, ZK PAN, Gliwice 2005, p.229-231 [ISBN 83-916351-2-0]

6. A. Adamski, Z. Sojka, E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "CW-EPR Studies of the Reactivity of Co-Salen-py and Co-Salen-py/Y Oxidation Catalysts", Scientific Programme. 9th Int. Workshop on EPR of Disordered Systems EMARDIS, Sofia 2005, p.51
7. J. Barbasz, N. Spiridis, J. Korecki "Wpływ terminacji powierzchni $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$ na adsorpcję złota", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.36 [ISBN 83-920331-2-4]
8. W. Barzyk "Orientation / 2-D-Phase Transitions in Soluble Monolayers at the Air/water Interface", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-P3 [ISBN 83-89936-07-0]
9. W. Barzyk, E. Rogalska, S. Campagna "Penetration of Antimicrobial Peptides to Phospholipid Monolayers (DPPC or DPPG) Used as Model Biological Membranes", Proc. 18th Polish Peptide Symposium, Wrocław 2005
10. M. Bazarnik, K. Bahranowski, M. Zimowska, A. Michalik, E. M. Serwicka, Z. Olejniczak "Influence of Al Substitution on the Textural Properties of FSM Mesoporous Silicas", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.42
11. M. Bazarnik, M. Zimowska, Z. Olejniczak, E. Serwicka, K. Bahranowski "Dotowanie glinem mezoporowatych materiałów krzemionkowych typu FSM-16", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S9-P13 [ISBN 83-89936-07-0]
12. A. Bielański, A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska "Solid Heteropolyacids as the Catalysts for Alcohol to Olefin Addition (Case Study)", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IKiFP PAN, Kraków 2005, p.40 [ISBN 83-920331-7-5]
13. L. Brabec, A. Zikánova, M. Kočirik, A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Hydrothermal Synthesis of Zeolite Layers. Kinetics of Growth and Visualization of Grain Boundaries by HF-Etching", Book of Abstracts, Int. Symp. "Catalytic Processes on Advanced Micro- and Mesoporous Materials", Nessebar 2005, p.74
14. A. Bratek, B. Jachimska, Z. Adameczyk "Influence of pH and Ionic Strength on the Structure of Polyacrylic Acid (PAA) in Aqueous Solutions", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S12-P3 [ISBN 83-89936-07-0]
15. D. V. Brazhnyk, Yu. P. Zaitsev, I. V. Bacherikova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch "Catalytic Oxidation of H_2S on Activated Carbon KAU", Proc. 4th Int. Conf. on Environmental Catalysis, Heidelberg 2005, p.274
16. V. Brazhnyk, Yu. Zaitsev, I. V. Bacherikova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, M. Mikołajczyk, A. Kowal "Catalytic Oxidation of Low Concentrations of H_2S on Activated Carbon KAU and V/KAU Catalysts", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.67 [ISBN 83-920331-2-4]

17. E. Broclawik, R. Rejmak, P. Kozyra, J. Datka "Modelowanie kwantowochemiczne (DFT) oddziaływania alkenów z centrami Cu⁺ w zeolitach", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.227 [ISBN 83-920331-2-4]
18. A. Burkat, W. Kobyzewa, A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Synteza zawiesin koloidalnych nanokryształów zeolitów typu MFI (silikalit-1) oraz BEA", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.354 [ISBN 83-920331-2-4]
19. N. Carmona, A. Kowal, J. Rincon, M. Villegas "AFM Assessment of the Superficial Nano/microstructure on Chemically Damaged Historical and Model Glasses", Book of Abstracts. 10th EuCheMS, Rimini 2005
20. E. V. Cheburakova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, J. Haber "Modification of VPO Catalysts for Phtalic Anhydride Production", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.255
21. E. V. Cheburakova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, J. Haber "The n-Pentane Partial Oxidation and Catalysts for Its Realization", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.260 [ISBN 83-920331-2-4]
22. A. Chumakov, P. T. Jochym, J. Korecki, J. Lazewski, K. Parliński, R. Röhlberger, R. Rüffer, B. Sepioł, M. Sladeczek, T. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, G. Vogl "Nano-scale Systems: Dynamics", Mater. Symp. on Nuclear Resonant Scattering, ESRF, Grenoble 2005
23. A. Chumakov, P. T. Jochym, J. Korecki, J. Lazewski, K. Parliński, R. Röhlberger, R. Rüffer, B. Sepioł, M. Sladeczek, T. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, G. Vogl "Vibrational Density of States in Ultrathin Fe Films on W(110) from Nuclear Inelastic Scattering of Synchrotron Radiation", Mater. 23rd European Conf. on Surface Science, Berlin 2005, p.97
24. R. Dula, I. Gressel, D. Mucha, E. M. Serwicka "Catalytic Activity of Mg-Ga-V Mixed Oxide Systems Obtained from LDH-Type Precursors in the ODH of Propane", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.92
25. R. Dula, I. Gressel, D. Mucha, E. M. Serwicka "Syntetyczne hydrotalkity magnezowo-galowe dotowane wanadem jako prekursorzy katalizatorów do utleniającego odwodornienia propanu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.75 [ISBN 83-920331-2-4]
26. R. Dula, R. Janik, T. Machej, P. Olszewski, J. Stoch, E. M. Serwicka "Hydrotalcite-derived Mn-Containing Mixed Oxides as Catalysts for Removal of VOCs", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IKiFP PAN, Kraków 2005, p.46 [ISBN 83-920331-7-5]

27. R. Dula, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka, J. Stoch "New Mn-Containing Catalytic Materials for the Total Combustion of Toluene", Book of Extended Abstracts. Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005, ZK PAN, Gliwice 2005, p.129-130 [ISBN 83-916351-2-0]
28. R. Dula, D. Mucha, J. Stoch, E. M. Serwicka "Wpływ sposobu dotowania manganem na właściwości fizykochemiczne syntetycznych hydrotalkitów Mg-Al", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S9-P5 [ISBN 83-89936-07-0]
29. R. Dula, P. Olszewski, E. M. Serwicka "Comparison of the Thermal Evolution of Layer- and Interlayer-manganese-doped Mg-Al Hydrotalcite-like Compounds", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.30
30. R. Dula, P. Olszewski, E. M. Serwicka "Wpływ substytucji galem na ewolucję termiczną syntetycznych hydrotalkitów typu Mg-Al. interkalowanych anionami dekanadanowymi", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.263 [ISBN 83-920331-2-4]
31. R. Dula, J. Połtowicz, E. M. Serwicka "Aktywność katalityczna syntetycznych hydrotalkitów zawierających mangan w reakcji utleniania cykloheksenu tlenem molekularnym", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-P35 [ISBN 83-89936-07-0]
32. P. Dyshlovenko, P. Warszyński "Numerical Study of Electrostatic Colloidal Interaction at Charged Interface", Book of Abstracts. Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.44 [ISBN 83-920331-4-0]
33. S. Dźwigaj, J. Janas, T. Machej, M. Che "Selective Catalytic Reduction of NO by Alcohols on Co and Fe Sites Catalysts", Book of Extended Abstracts. Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005, ZK PAN, Gliwice 2005, p.265-266 [ISBN 83-916351-2-0]
34. U. Filek, A. Mohamed, B. Sulikowski "Synteza mezoporowatych sit molekularnych typu SBA-15 i ich modyfikacja kwasem fosforowo-wolframowym", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.265 [ISBN 83-920331-2-4]
35. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Investigation of the Mechanism of Actin Polymerization Induced by Myosin Subfragment-1 Using Dynamic Light Scattering", Book of Abstracts. 18th Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 3rd Spring Meeting on Bioelectrochemistry, Coimbra 2005, paper P-165
36. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Mechanism of Actin Polymerization by Myosin Subfragment-1 Probed by Dynamic Light Scattering", in: "Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005" (ed. K. A. Wilk), Edu-Sa, Wrocław 2005, p.313-315 [ISBN 83-920032-3-3]

37. A. Gil, Z. Żurek, B. Sulikowski, A. Stawiarski, A. Kuc, J. Żurek "The Phase Transformation Caused by Corrosion Degradation of Ternary and Quaternary Gamma-TiAl-Based Alloys in SO₂ Atmosphere", Book of Abstracts. Int. Conf. on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2005, Phoenix 2005, p.46
38. B. Gil, J. Datka, A. Kubacka, J. Janas, B. Sulikowski "NO Adsorption on the Active Sites of Co- and/or In-Containing Ferrierite Catalysts for the CH₄-SCR-NO Process", Book of Abstracts and Recent Research Reports. 3rd FEZA Conf., Prague 2005, paper Po-115
39. B. Gil, A. Micek-Ilnicka "Sorpcja amoniaku na heteropolikwasach typu Keggina i Dawsona", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.269 [ISBN 83-920331-2-4]
40. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Relative Stability of V₂O₅ Surfaces: (100), (010), (001)", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.48 [ISBN 83-920331-7-5]
41. A. Gomułczak, K. Wieczorek-Ciurowa, K. Gamrat, J. Stoch "Characteristics of Mechanically Activated Mixtures of V₂O₅ with Cr₂O₃", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.70 [ISBN 83-920331-7-5]
42. A. Gomułczak, K. Wieczorek-Ciurowa, J. Rakoczy, J. Stoch "Ocena skutków mechanicznej aktywacji tlenków V₂O₅-Cr₂O₃ jako prekursorów katalitycznych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.63 [ISBN 83-920331-2-4]
43. K. Góra-Marek, A. Klisińska, B. Grzybowska, J. Datka "Badania IR centrów kwasowych katalizatorów do utleniającego odwodornienia propanu i etanu: układy VO_x/SiO₂ i VO_x/MgO", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.273 [ISBN 83-920331-2-4]
44. R. Grabowski "Modelowanie kinetyki utleniającego odwodornienia alkanów na katalizatorach wanadowych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.30 [ISBN 83-920331-2-4]
45. R. Gryboś, M. Witko "Influence of Alkali Metal (Li, Na, K, Rb) Dopant on the Catalytic Activity of (010)V₂O₅: Cluster DFT Studies", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.128
46. R. Gryboś, M. Witko "Geometric Structure of Vanadia Active Phase over (001)TiO₂ (Anatase) Support under Ambient Conditions: a Periodic DFT Study", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.128
47. R. Gryboś, M. Witko "Vanadium Oxide on Anatase Surface. Theoreticians View", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.27 [ISBN 83-920331-7-5]

48. B. Grzybowska-Świerkosz "Nano-Au/oxide Support Catalysts in Oxidation Reactions: Provenance of Active Oxygen Species", Materials. 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005
49. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Oxide Catalysts: What We Know, and What We Would Like to Know", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.15 [ISBN 83-920331-7-5]
50. J. Haber, J. Janas, J. Kryściak, T. Machej, H. Sadowska "Mechanizm pełnego utleniania nitroalkanów na przykładzie nitrometanu i nitroetanu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.172 [ISBN 83-920331-2-4]
51. J. Haber, J. Janas, J. Kryściak, T. Machej, H. Sadowska "The Role of Support in Catalysts for Oxidation of Nitromethane", Book of Extended Abstracts. Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005, ZK PAN, Gliwice 2005, p.131-132 [ISBN 83-916351-2-0]
52. J. Haber, T. Machej, J. Janas, M. Nattich "Nitrous Oxide Decomposition over Rh Supported on γ -Alumina Catalysts", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.277
53. J. Haber, T. Machej, M. Nattich, J. Janas "Influence of Promoters on Activity and Thermal Stability of Rhodium Catalyst in Decomposition of N_2O ", Book of Extended Abstracts. Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005, ZK PAN, Gliwice 2005, p.275-276 [ISBN 83-916351-2-0]
54. J. Haber, T. Machej, M. Nattich, J. Kryściak "Wpływ NO na aktywność katalizatora Rh/ γ - Al_2O_3 w reakcji rozkładu tlenku diazotu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.174 [ISBN 83-920331-2-4]
55. J. Haber, T. Machej, M. Nattich "Wpływ O_2 i NO na aktywność katalizatorów rodowych w reakcji rozkładu podtlenku azotu", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S8-P31 [ISBN 83-89936-07-0]
56. J. Haber, K. Pamin, J. Połtowicz "Comparison of Catalytic Activity of Metallosalen Complexes Encapsulated in Different Zeolite Structure in Oxidation of Hydrocarbons", Proc. 5th World Congr. on Oxidation Catalysis, Sapporo 2005
57. J. Haber, J. Stoch, V. A. Zazhigalov "Transition Metal Promoted VPO Catalysts in Selective Oxidation of pPropane, n-Butane and n-Pentane", Proc. 5th World Congr. on Oxidation Catalysis, Sapporo 2005
58. J. Haber, J. Stoch, V. A. Zazhigalov "Transition Metal Promoted VPO Catalysts in Selective Oxidation of Propane, n-Butane and n-Pentane", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.33 [ISBN 83-920331-7-5]

59. P. Hejduk, K. Hermann, M. Witko "Probing Active Oxygen Sites at Undercoordinated Vanadium Oxide Surfaces by Hydrogen: ab initio DFT Cluster Studies for $V_2O_5(001)$ ", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.129
60. P. Hejduk, M. Witko "Adsorpcja wodoru na niewysyczonej powierzchni V_2O_5 ", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-P36 [ISBN 83-89936-07-0]
61. P. Hejduk, M. Witko, K. Hermann "Kwantowo-chemiczne badania struktury elektronowej niewysyczonej powierzchni $V_2O_5(001)$ ", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.48 [ISBN 83-920331-2-4]
62. P. Hejduk, M. Witko, K. Hermann "Theoretical Approach to Investigate Into Active Sites at Undercoordinated Vanadium Oxide Surfaces by Hydrogen: Ab initio DFT Cluster Studies for $V_2O_5(001)$ ", Mater. 2nd Int. School - Conference on Catalysts Design for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005, p.63
63. P. Hejduk, M. Witko, K. Hermann "Hydrogen Adsorption at V_2O_5 : DFT Cluster Studies for Saturated and Unsaturated Surfaces", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), I KiFP PAN, Kraków 2005, p.28 [ISBN 83-920331-7-5]
64. B. Jachimska, Z. Adamczyk, A. Galińska-Rakoczy "Characterization of Polelectrolyte by Dynamic Light Scattering and Viscosity Measurements", Book of Abstracts. 18th Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 3rd Spring Meeting on Bioelectrochemistry, Coimbra 2005, paper P-166
65. S. Jakiela, K. Cieślak, Z. Olejniczak, Ł. Bratasz "Measurement of Moisture Transport in Wood Using Low Field 1D-MRI", Mater. 38. Ogólnopolskiego Seminarium na Temat Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2005
66. T. Jasiński, P. Warszyński "Molecular Mechanics Simulations of Adsorption of Single Hydrocarbon Chain Surfactants at Air/water Interface", Mater. Konferencyjne. Symp on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Application, Wólka Milanowska 2005, p.84
67. T. Jasiński, P. Warszyński "Molecular Mechanics Simulations of Adsorption of Single Hydrocarbon Chain Surfactants at Air/water Interface" Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005, p.47
68. E. Jarek, P. Warszyński "Theoretical Model of Simultaneously Adsorption of Ionic and Nonionic Surfactant Mixtures at the Air/Solutions Interface", Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005, p.46
69. E. Jarek, P. Wydro, M. Paluch, P. Warszyński "Surface Properties of Mixtures of Surface Active Sugar Derivatives with Ionic Surfactants. Theoretical and experimental investigations", Abstracts. SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków 2005, p.6

70. K. Jaszczółt, Z. Adamczyk, B. Siwek "Surface Clusters of Colloid Particles Produced by Deposition on Sites", Book of Abstracts. Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.38 [ISBN 83-920331-4-0]
71. V. Jovanović, A. Kowal "Characterization of Silver Particles Spontaneously Deposited on Glassy Carbon", The Book of Abstracts, YUCOMAT 2005, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade 2005
72. V. Jovanović, A. Kowal "Characterization of Silver Particles Spontaneously Deposited on Glassy Carbon", Book of Abstracts, 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
73. T. Kasza, A. Stokłosa, J. Zajęcki, S. S. Kurek, P. Olszewski "Cienkie filmy TiO₂ jako fotokatalizatory do usuwania lotnych zanieczyszczeń powietrza", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.176 [ISBN 83-920331-2-4]
74. T. Kasza, A. Stokłosa, J. Zajęcki, P. Olszewski "Thin TiO₂ Films Deposited on Ceramic Supports as 'Self-Cleaning' Photocatalytic Systems", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.206
75. E. Klimiec, S. Nowak, W. Zaraska, J. Stoch "The Influence of TiO₂ on the Structure, Resistance and Electrical Stability of Bulk Resistors Operating in High Voltage (15kV) Impulse Circuit", Proc. 29th Int. Conf. of Int. Microelectronics and Packaging Soc., Koszalin-Darłówo 2005
76. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The Opposite Effects of Potassium Additive on the Catalytic Performance in Oxidative Dehydrogenation of C₂-C₄ Alkanes over VO_x/Oxide Support Catalysts", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.176
77. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The Different Effects of Potassium Additive on the Catalytic Performance in Oxidative Dehydrogenation of Alkanes C₂-C₄ over VO_x/Oxide Support Catalysts", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.275 [ISBN 83-920331-2-4]
78. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The opposite Effects of Potassium Additive on the Catalytic Performance in Oxidative Dehydrogenation of Alkanes C₂-C₄ over VO_x/Oxide Supports Catalysts", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), I KiFP PAN, Kraków 2005, p.53 [ISBN 83-920331-7-5]
79. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The Positive and Negative Effects of Potassium Additive on Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Lower Alkanes on VO_x/oxide Supports Satalysts", Mater. 2nd Int. School - Conference on Catalysis for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005, p.62

80. D. Kmiec, B. Sepioł, M. Sladeczek, G. Vogl, J. Korecki, T. Ślęzak, R. Ruffer, T. Vanormelingen, A. Vantomme "Depth Dependence of Iron Diffusion in Fe₃Si", Mater. MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005, p.31-32
81. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Transformation of Meso- and Macroporous Amorphous Aluminosilicates into Composite Materials Containin g Nanocrystalline Y Zeolite Domains", Book of Abstracts, Int. Symp. "Catalytic Processes on Advanced Micro- and Mesoporous Materials", Nessebar 2005, p.95
82. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Recrystallization of Amorphous Aluminosilicates into Composite Meso/macroporous Systems with FAU Domains", Book of Abstracts and Recent Research Reports. 3rd FEZA Conf., Prague 2005, paper RR-23
83. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka materiału MCM-50", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.359 [ISBN 83-920331-2-4]
84. M. Kolasińska, R. Krastev, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolytes Multilayers, Effect of PEI Anchoring Layer and Post-treatment after Deposition", Book of Abstracts. 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.67
85. M. Kolasińska, P. Nowak, A. Trybała, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers; Comparison of PAH/PSS and Chitosan/alginate Systems", Book of Abstracts. Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.21-22 [ISBN 83-920331-4-0]
86. M. Kolasińska, A. Trybała, P. Warszyński "Ellipsometric Study and Wetting Properties of Polyelectrolytes Multilayers. Comparison of PAH/PSS and Chitosan/Alginate Systems", Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005, p.98
87. J. Korecki, A. Chumakov, P. T. Jochym, J. Lazewski, K. Parliński, R. Röhlberger, R. Ruffer, B. Sepioł, M. Sladeczek, T. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, G. Vogl "Studying Nanostructures with Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", Mater. Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005, p.21
88. A. Kowal, J. Czyżniewska, L. Pavlovic, M. Pavlovic, C. Gutierrez "Ti/SnO₂(Sb) Electrodes Used for Decomposition of Organic Pollutants in Water", Knijga Radova. Symposium 'Wodowody i Kanalizacja', Herzeg Novi 2005
89. A. Kowal, K. Kusak "Dynamika powierzchni elektrokatalizatora niklowego badana techniką in-situ STM", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.286 [ISBN 83-920331-2-4]
90. A. Kowal, P. Olszewski "Badania wielkości cząstek elektrokatalizatora platynowego metodami STM, AFM i XRD", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.288 [ISBN 83-920331-2-4]

91. A. Kowal, P. Olszewski, D. Tripković, R. Stevanović "Nanoscale Topography of GC/Pt-C and GC/Pt-Ru-C Electrodes Studied by Means of STM, AFM and XRD Methods", Book of Abstracts, YUCOMAT 2005, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade 2005
92. A. Kowal, D. Waszak, M. Walkowiak "Badania elektrody grafitowej z dodatkiem azotku boru metodami AFM i XRD", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.290 [ISBN 83-920331-2-4]
93. W. Kraus "Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN – naukometryczny obraz 50-lecia", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.366 [ISBN 83-920331-2-4]
94. W. Kraus "'Ecological Chemistry and Engineering' – Material for Bibliometric Rating of the Journal", Abstracts. 10th Int. Scientific Conf. Metal Ions and Other Abiotic Factors in the Environment, Kraków 2005, p.9-10
95. M. Krzan, S. Cohen-Addad, R. Höhler "Rheology and Stability of Particle Laden Foams", Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
96. A. Kubacka, J. Janas, E. Włoch, B. Sulikowski "[In, Co]-Ferrierite: a Highly Resistant Catalyst for the deNO_x Process under Hydrothermal Conditions", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.282
97. A. Kubacka, J. Janas, E. Włoch, B. Sulikowski "Wysokoodporny katalizator ferrierytowy do selektywnej katalitycznej redukcji NO w obecności pary wodnej", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.182 [ISBN 83-920331-2-4]
98. A. Kubacka, E. Włoch, Z. Olejniczak, V. Cortés Corberán, R. X. Valenzuela, A. Fuerte, B. Sulikowski "Functionalisation of Propane on Mesoporous Molecular Sieves", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.177
99. E. Lalik, J. Rakoczy, R. Mirek, A. J. Groszek "Efekty cieplne sorpcji wody i etanolu w materiałach mikroporowatych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.299 [ISBN 83-920331-2-4]
100. J. Łojewska, A. Lubańska, L. Proniewicz "Badania in-situ kinetyki degradacji papieru metodą FTIR", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.189 i 373 [ISBN 83-920331-2-4]
101. T. Machej "Current Trends in Development of Catalysts for VOC Emission Abatement", Mater. Konf. 'Emise organických látek z technologických procesů a metody jejich snižování', Pardubice 2005, p.59
102. T. Machej "Catalytic System – SWINGTHERM", Mater. Konf. 'Emise organických látek z technologických procesů a metody jejich snižování', Pardubice 2005, p.60

103. T. Machej, J. Janas, H. Sadowska "Selektywna katalityczna redukcja NO etanolem", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.190 [ISBN 83-920331-2-4]
104. T. Machej, R. Janik, H. Sadowska "Niskotemperaturowy katalizator do utleniania lotnych związków organicznych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.192 [ISBN 83-920331-2-4]
105. M. Macherzyński, A. Kowal, B. Macherzyńska, J. Gołaś "Microscopic Studies of the GC/poly-NiTMHPP/Nafion Electrochemical Nitric Oxide Sensor", The Book of Abstracts, YUCOMAT 2005, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade 2005
106. K. Małyś, M. Krzan, M. Krasowska "Dynamic Effects in Formation of the Dispersed Systems", Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
107. L. Matachowski, D. Mucha, J. Haber, M. Mikołajczyk, L. Lityńska-Dobrzyńska, Z. Czula "New Evidence on the Structure of $K_xH_{3-x}PW_{12}O_{40}$ Salts", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.303 [ISBN 83-920331-2-4]
108. L. Matachowski, D. Mucha, E. Lalik, J. Stoch, J. Haber, B. Gil, Z. Olejniczak "New Observations of $Cs_{2.5}H_{0.5}PW_{12}O_{40}$ Salt Structure", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.305 [ISBN 83-920331-2-4]
109. L. Matachowski, K. Pamin, J. Połtowicz, E. M. Serwicka, W. Jones "Mezoporowate sita molekularne jako nośniki metaloporfiryn w reakcji katalitycznego utleniania cyklooktanu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.100 [ISBN 83-920331-2-4]
110. M. Menke, M. Szaleniec, P. Nowak, G. Stochel, M. Witko "Dehydrogenaza etylobenzenowa – biokatalityczne utlenianie alkiloaromatów", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.221 [ISBN 83-920331-2-4]
111. A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska, J. Poźniczek, A. Bielański "Catalytic Synthesis of Ethyl-tert-butyl Ether (ETBE) on Wells-Dawson Type Solid Heteropolyacid $H_6P_2W_{18}O_{62}$ ", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.197
112. A. Micek-Ilnicka, J. Poźniczek, A. Lubańska, A. Bielański "Synteza eteru etylo-tert-butyloвого na heteropolikwasach typu Keggina w porównaniu z heteropolikwasami typu Dawsona", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.102 [ISBN 83-920331-2-4]
113. A. Michna, Z. Adamczyk, M. Zembala "Detekcja multiwarstw polimerów na powierzchniach za pomocą układów koloidalnych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.374 [ISBN 83-920331-2-4]

114. P. Miśkowiec, J. Łojewska, A. Lubańska, L. M. Proniewicz "Badanie rodzajów i funkcji wody w papierze za pomocą metod FTIR oraz DSC i TG", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S4-P65 [ISBN 83-89936-07-0]
115. D. Nikolova, R. Kardijeva, A. Kozłowska, E. M. Serwicka, T. Grozeva, M. Crisan, P. Tzvetkov "The Oxide Precursor State of Molybdenum Water-gas Shift Catalysts Supported on Al₂O₃ and TiO₂: Texture Study and Catalytic Activity", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.33
116. I. Nowak, M. Misiewicz, M. Ziółek, A. Kubacka, B. Sulikowski "Kwasowo-zasadowe właściwości układów tlenkowych zawierających gal i niob", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-P14 [ISBN 83-89936-07-0]
117. A. Pacuła, T. Biswick, W. Jones, E. M. Serwicka "Otrzymywanie warstwowych materiałów typu hydroksysoli zawierających jony metali przejściowych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.379 [ISBN 83-920331-2-4]
118. A. Pacuła, R. Dula, K. Pamin, E. M. Serwicka "Badanie metodą EPR właściwości redokswych heteropolikwasów osadzonych na nośniku montmorillonitowym", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-P25 [ISBN 83-89936-07-0]
119. A. Pacuła, K. Pamin, R. Dula, A. Kozłowska, E. M. Serwicka "Synteza i właściwości fizykochemiczne H₃PMo₁₂O₄₀ osadzonego w matrycy montmorillonitu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.310 [ISBN 83-920331-2-4]
120. A. Pacuła, K. Pamin, A. Kozłowska, R. Dula, E. M. Serwicka "Influence of the Preparation Method on the Catalytic Performance of Heteropolyacid/montmorillonite Catalysts", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.31
121. A. Pacuła, K. Pamin, A. Kozłowska, J. Komorek E. M. Serwicka "Preparation and Characterization of 12-Tungstophosphoric Acid Supported on Montmorillonite", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.31
122. A. Pacuła, K. Pamin, A. Kozłowska, J. Komorek, E. M. Serwicka "Montmorillonit – naturalny minerał warstwowy jako nośnik heteropolikwasów", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.37 [ISBN 83-920331-2-4]
123. A. Pacuła, K. Pamin, J. Kryściak-Czerwenka, E. Lalik, Z. Czula, E. M. Serwicka "Wpływ preparatyki na właściwości fizykochemiczne heteropolikwasu osadzonego w matrycy montmorillonitu", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-P24 [ISBN 83-89936-07-0]

124. A. Pacuła, K. Pamin, J. Kryściak-Czerwenka, Z. Olejniczak, R. Dula "Montmorillonite as Supports for Heteropolyacids", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IKiFP PAN, Kraków 2005, p.44 [ISBN 83-920331-7-5]
125. K. Pamin, J. Haber "Aktywność katalityczna heteropolikwasów o strukturze Keggina w reakcji odwadniania izopropanolu w zależności od rodzaju heteropolokwasu oraz typu nośnika", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.113 [ISBN 83-920331-2-4]
126. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Cycloalkanes Oxidation with Molecular Oxygen Catalysed by Encapsulated Metallosalen Complexes", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.242
127. K. Pamin, J. Połtowicz, D. Mucha, J. Haber "Sole kobaltowe heteropolikwasów o strukturze Keggina jako katalizatory utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.115 [ISBN 83-920331-2-4]
128. K. Pamin, J. Połtowicz, D. Mucha, J. Haber "Effect of Cobalt Counter-cation on Catalytic Properties of Tungstophosphoric and Molybdophosphoric Acids", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-K4 [ISBN 83-89936-07-0]
129. T. Pańczyk "Kinetics of Nitrogen Dissociative Adsorption on the Ru(0001). An Analysis Based on the Statistical Rate Theory", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.238 [ISBN 83-920331-2-4]
130. T. Pańczyk, W. Gac, M. Pańczyk, T. Borowiecki, W. Rudziński "Surface Acidity of Alumina-Magnesia Support of Nickel Catalysts", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IKiFP PAN, Kraków 2005, p.69 [ISBN 83-920331-7-5]
131. T. Pańczyk, W. Rudziński "Współczynnik przyklejenia w świetle Statystycznej Teorii Transportu Międzyfazowego", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-K16 [ISBN 83-89936-07-0]
132. W. Piasecki "Simultaneous Analysis of Different Experimental Data Measured for Metal Oxide/electrolyte Solution Interface Based on 1-pK Basic Stern Model", Book of Abstracts. 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.177
133. G. Para, E. Jarek, P. Warszzyński "Hofmeister Series Effects in Adsorption of n-Alkyl Trimethyl Ammonium Bromide Cationic Surfactants at Fluid Interfaces", Book of Abstracts. 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.37
134. G. Para, E. Jarek, P. Warszzyński "Hofmeister Series of Anions and Adsorption Cationic Surfactants at Fluid Interfaces", Abstracts. 3rd Thermodynamics Polish-French Days, Carry le Rouet 2005, p.42

135. K. Parliński, P. T. Jochym, J. Lazewski, A. M. Oleś, P. Piekarczyk, M. Sternik, J. Korecki "Ab initio Phonon Calculations on Multilayers, Crystal Surfaces and Crystals with Heavy Elements", Mater. PSIK 2005, Schwäbisch Gmünd 2005
136. J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Synteza i badanie właściwości fizykochemicznych fluorowanych i perfluorowanych kompleksów metaloporfirynowych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.318 [ISBN 83-920331-2-4]
137. J. Połtowicz, E. Tabor, K. Pamin, J. Haber "Metalloporphyrins and Their μ -Oxo Complexes in Oxidation of Cycloalkanes with Molecular Oxygen", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.254
138. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Fluorowa kataliza dwufazowa – Metaloporfiryny kobaltu jako katalizatory epoksydacji olefin", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-K3 [ISBN 83-89936-07-0]
139. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Pernitrometalloporphyrins with Fluorous Ponytails as Catalysts in Epoxidation of Alkenes", Book of Abstracts, Int. Symp. on Fluorous Technologies, Bordeaux 2005, p.11
140. J. Poźniczek, A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska, A. Bielański "Synteza ETBE na katalizatorach: $H_6P_2W_{18}O_{62} / TiO_2$ i $H_6P_2W_{18}O_{62} / SiO_2$ ", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.26-27 [ISBN 83-920331-2-4]
141. R. Rachwalik, S. R. G. Carrazan, B. Sulikowski, P. Ruiz "N₂O as a Gaseous Promoter During Oxidative Dehydrogenation of Propane Over Nickel Molybdate Supported on the [Si,V]-MCM-41 Molecular Sieve", Mater. 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005, paper 5
142. R. Rachwalik, A. Kubacka, Z. Olejniczak, U. Filek, B. Sulikowski "Disproportionation of Toluene on HPW/Porous Materials", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.85
143. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, J. Jiao, M. Hunger, B. Sulikowski "Shape-selective Isomerization of 1,2,4-Trimethyl-benzene on Ferrierite-based Catalysts", Mater. 38. Ogólnopolskiego Seminarium na Temat Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2005, p.77-78
144. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Transformations of m-Xylene over Dealuminated Ferrierite", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.186
145. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Właściwości katalityczne modyfikowanych ferrierytów w procesach transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.45 [ISBN 83-920331-2-4]

146. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Wpływ procesu dealuminiowania heksafluorokrzemianem amonu na właściwości fizykochemiczne i katalityczne ferrierytu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.119 [ISBN 83-920331-2-4]
147. J. Rakoczy, R. Rachwalik, J. Nowakiewicz, B. Sulikowski "Catalytic Performance of Ferrieryte Studied in Transformations of Alkylaromatic Hydrocarbons: A Comparison with Y and ZSM-5 Type Zeolite", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.121 [ISBN 83-920331-2-4]
148. M. Ruszel, B. Grzybowska, K. Samson, I. Gressel, A. Klisińska, M. Gąsior "Au/FeO_x i Au/M^{II}Cr₂O₄ jako katalizatory utleniania CO i węglowodorów C₃", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.125 [ISBN 83-920331-2-4]
149. E. Rogalska, M. Badis, W. Barzyk "Penetration of Biologically Active Antimicrobial Substances to Phospholipid Monolayers Used as Model Biological Membrane", Book of Abstracts. 18th Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 3rd Spring Meeting on Bioelectrochemistry, Coimbra 2005
150. W. Rudziński, T. Pańczyk "Quantative Analysis of the Thermodesorption Spectra from Catalyst Surface Based on the Statistical Rate Theory Approach", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.17 [ISBN 83-920331-2-4]
151. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "QM/MM Free Energy Perturbation Method Applied to Predict Acid Constants and Redox Potentials in Proteins", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-P99 [ISBN 83-89936-07-0]
152. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Kwantowo-chemiczny opis truktury elektronowej i właściwosci katalitycznych metaloporfiryn Co, Mn, Mo", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-P71 [ISBN 83-89936-07-0]
153. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Gąsior, K. Samson "Mixed Au Nanoparticles – Transition Metal Oxide Catalysts in Oxidation of CO and C₃ Hydrocarbons", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.67 [ISBN 83-920331-7-5]
154. M. Ruszel, B. Grzybowska, I. Gressel, A. Klisińska "Au/Mn(II)Cr₂O₄ Spinels as Catalysts in Oxidation of CO", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.314
155. M. Ruszel, B. Grzybowska, I. Gressel, A. Klisińska "Au/M^{II}Cr₂O₄ Spinels as Catalysts in Oxidation of CO and C₃ Hydrocarbons", Mater. 2nd Int. School - Conference on Catalysts Design for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005, p.33

156. M. Ruszel, B. Grzybowska, K. Samson, I. Gressel, A. Klisińska "M^{II}Cr₂O₃-spinels as Supports for Au Nanoparticles in Oxidation of CO", Mater. 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005
157. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "Acid Constants and Redox Potentials in Proteins Predicted by High-level QM/MM Free Energy Perturbations", Conf. Materials. "Quantum Chemistry Applied: From H₃ to Biocatalysis", Stockholm, 2005
158. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "Predicting of Acid Constants and Redox Potentials in Proteins with QM/MM Free Energy Perturbation Method", Conf. Materials. Workshop on Modeling Interactions in Biomolecules II, Prague 2005, paper P40
159. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, G. Stochel "DFT Studies on Ligand Binding Properties of Cobalamins", Conf. Materials. Workshop on Modeling Interactions in Biomolecules II, Prague 2005
160. P. Sarv, M. Derewiński, I. Heinmaa "Active Site Reinsertion and Redistribution in B,Al-Beta Zeolite Effected by Boron Removal", Book of Abstracts and Recent Research Reports. 3rd FEZA Conf., Prague 2005, paper OP-64
161. C. Simon, P. Petitjean, J. Beylich, C. Dejignant, G. Para, P. Warszyński "Preparation of PAH/PSS Microcapsules by Membrane Emulsification", Book of Abstracts. Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.42 [ISBN 83-920331-4-0]
162. M. Sladeczek, B. Sepioł, J. Korecki, T. Ślęzak, D. Kmieć, R. Rüffer, S. Stankov, G. Vogl "Diffusion-linked Hyperfine Relaxation in Sub-monolayer Iron Films", Mater. MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005, p.26-27
163. J. Słoczyński, R. Grabowski, A. Kozłowska, Z. Czula "Określenie kinetyki i mechanizmu powstawanie wysokozdyspergowanej miedzi podczas redukcji tlenkowych prekursorów katalizatorów do syntezy metanolu z CO₂", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.328 [ISBN 83-920331-2-4]
164. N. Spiridis, J. Barbasz, K. Freindl, J. Korecki "Gold Adsorption on Fe₃O₄(001)", Mater. MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005, p.9-10
165. N. Spiridis, J. Barbasz, J. Korecki "Gold Adsorption on Fe₃O₄(001)", Mater. Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005, p.41

166. S. Stankov, M. Sladeczek, T. Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis, B. Sepioł, G. Vogl, A. Chumakov, R. Ruffer "UHV Surface Science at the Nuclear Resonance Beamline at the ESRF", Mater. Int. Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME 2005, Montpellier, 2005
167. J. Stoch, J. Podobiński, A. Stoch, A. Brożek "Katalityczna destrukcja struktury węgla", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.131 [ISBN 83-920331-2-4]
168. B. Sulikowski, E. Włoch, Z. Żurek, A. Gil, M. Lekka, B. Żmudzińska-Żurek "Crystallization of Zeolite Coatings on Pre-oxidized Steel Substrates", Book of Abstracts. Int. Conf. on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2005, Phoenix 2005, p.53
169. M. Szaleniec, M. Menke, P. Nowak, J. Heider, M. Witko "Etylbenzene Dehydrogenase - Biocatalyst for the Hydroxylation of Ethylbenzene and Its Structural Analogues", Congress Proceedings. 3rd Moscow Inter. Congr. on Biotechnology: State of the Art and Prospects of Development, Moscow 2005, vol.2, p.216
170. M. Szaleniec, M. Menke, P. Nowak, J. Heider, M. Witko "Ethylbenzene Dehydrogenase - Enzymatic Hydroxylation of Ethylbenzene Derivates", Book of Abstracts. Catalysis and Biocatalysis in Green Chemistry, Cambridge 2005, paper O09
171. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, El Hadji Sambe, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Kinetics of Deposition of Model Micro-capsules in Surgical Steel with Surface Modified by Biocompatible Polyelectrolytes", Book of Abstracts. 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.275
172. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, M. Kolasińska, P. Warszyński "Deposition of Model Micro-capsules with Polyelectrolyte Shells on Surface of Modified Surgical Steel", Book of Abstracts. 3rd Thermodynamics Polish-French Days, Carry le Rouet 2005, p.46
173. L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, Z. Adamczyk "Deposition of Nano- and Microcapsules on Metals Using an Oblique Impinging Jet Cell", Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005, p.122
174. M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis, W. Karaś, K. Freindl, J. Korecki "Growth of Iron on Stepped W(110)", Mater. MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005, p.5-6
175. M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis, W. Karaś, K. Freindl, J. Korecki "Growth of Iron on Stepped W(110)", Mater. 23rd European Conf. on Surface Science, Berlin 2005, p 225
176. M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis, W. Karaś, K. Freindl, J. Korecki, "Growth and Magnetism of Fe on Flat and Stepped W(110)", Mater. Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005, p.39

177. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, Z. Sojka, A. Adamski "Badanie właściwości katalitycznych salenowych kompleksów metali przejściowych i ich organiczno-nieorganicznych hybryd", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.137 [ISBN 83-920331-2-4]
178. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Wpływ struktury porfiryn kobaltowych na ich aktywność katalityczną w reakcji utlenienia cyklooktanu", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-K2 [ISBN 83-89936-07-0]
179. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Porfiryny kobaltu jako katalizatory utleniania cyklooktanu w systemie Lyonsa", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.138 [ISBN 83-920331-2-4]
180. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Influence of Zeolite Structure on Catalytic Activity of Encapsulated Metallosalen Complexes in Aerobic Oxidation", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IKiFP PAN, Kraków 2005, p.55 [ISBN 83-920331-7-5]
181. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Cobalt Porphyrins as Catalysts for Oxidation of Cyclooctane in Lyons System", Mater. 2nd Int. School - Conference on Catalysts Design for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005, p.46
182. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Influence of the Structure of Iron Porphyrins on Catalytic Activity in Oxidation of Hydrocarbons", Mater. 5th Int. School on Molecular Catalysis, Organic and Polymer Synthesis and Catalysis, Poznań-Rosnówko 2005, p.95
183. F. Tanczikó, L. Bottyán, B. Croonenborghs, L. Deák, J. Korecki, D. G. Merkel, D. L. Nagy, R. Rüffer, H. D. Rüter, E. Szilágyi, K. Szymański, Á. Tunyogi, V. Vanhoof "Energy- and Time-domain Mössbauer Magnetometry of Thin Films Using Polarized Sources", Mater. Int. Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME 2005, Montpellier, 2005
184. K. Terpiłowski, M. Krasowska, J. Zawała, E. Chibowski, K. Małysa "Effect of Modifications of Roughness of the Teflon Surface on Contact Angle Values and the Bubble Attachment", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-P103 [ISBN 83-89936-07-0]
185. R. Tokarz-Sobieraj "DFT Cluster Model Studies of Molybdenum Based Catalysts", Book of Abstracts. 1st Int. Symp. on Methods and Applications of Computational Chemistry, Kharkiv 2005, p.9
186. R. Tokarz-Sobieraj "Metoda DFT jako narzędzie badań przemian zachodzących w trakcie reakcji katalitycznej na powierzchni katalizatorów Mo-O", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-W7 [ISBN 83-89936-07-0]

187. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Quantum Chemical Description of Oxygen Activation Process on Selected Metalloporphyrins", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.131
188. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, "Oxygen Species on Molybdenum-based Catalysts – Cluster DFT Studies", Book of Abstracts, ISHHC 12th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, (eds. V. Dal Santo et al.), Edizioni Tassinari, Firenze 2005, p.232 [ISBN 88-87057-34-6]
189. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Porównanie procesu aktywacji tlenu na porfirynach molibdenowych, kobaltowych i manganowych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.249 [ISBN 83-920331-2-4]
190. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, "Effect of Support and Additives on Properties of Molybdena-Based Catalysts", Book of Abstracts. Deutsche Physikalische Gesellschaft, Berlin 2005, p.473
191. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Quantum Chemical Description of Surface Active Centres on Vanadium-based Catalysts", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.129
192. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Porównanie struktury elektronowej i geometrycznej MoO₃, CoMoO₄ i MnMoO₄", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.251 [ISBN 83-920331-2-4]
193. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Kwantowo-chemiczne badania struktury elektronowej powierzchni mieszanych tlenków metali przejściowych na bazie tlenków wanadu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.253 [ISBN 83-920331-2-4]
194. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Wpływ nośnika i dodatków na właściwości katalizatorów molibdenowych. Obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-P80 [ISBN 83-89936-07-0]
195. D. Tripkovic, S. Gojkovic, K. Popovic, J. Lovic, D. Tripkovic, A. Kowal "Kinetic Study of Formic Acid Oxidation at Carbon-supported Platinum Electrocatalyst", Book of Abstracts, 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
196. D. Tripković, A. Kowal, P. Olszewski "Nanoscale Topography of GC/Pt-C and GC/Pt-Ru-C Electrodes Studied by Means of STM, AFM and XRD Methods", Book of Abstracts, 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
197. D. Tripković, K. Popović, J. Lović, V. Jovanović, A. Kowal "Badania elektrokatalitycznego utleniania etanolu na poli- i monokrystalicznych elektrodach platynowych", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IKiFP PAN, Kraków 2005, p.140 [ISBN 83-920331-2-4]

198. D. Tripković, S. Terzić, A. Tripković, A. Kowal, V. Jovanović "The Effect of Electrochemically Treated Classy Carbon on the Activity of Supported Pt Catalyst", Book of Abstracts, 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
199. D. Tripković, S. Terzić, V. Jovanović, A. Kowal "Characterization of Platinum Nanoparticles Electrochemically Deposited on Glassy Carbon", The Book of Abstracts, YUCOMAT 2005, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade 2005
200. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, El Haidi Sambe, Z. Adamczyk, P. Warszyński, "Kinetics of Deposition of Model Micro-capsules on Surgical Steel with Surface Modified by Biocompatible Polyelectrolytes", Book of Abstracts. 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.275
201. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, E. Sambre, P. Warszyński "Deposition of Model Micro-capsules on Modified Surface of Surgical Stainless Steel", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S9-K5 [ISBN 83-89936-07-0]
202. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, El Hadji Sambe "Deposition of Model Microcapsules with Biocompatible Shells on Surface of Modified Surgical Steel", Book of Abstract. SFC EuroChem 2005, Nancy, p.253
203. W. Turek, J. Haber, A. Krowiak "Determination of the Type of Active Centres on the Catalyst Surface Bsed on Kinetic Measurements Using a Test Reaction", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.91
204. W. Turek, J. Haber, A. Krowiak "Ocena rodzajów centrówaktywnych na powierzchni katalizatorów na podstawie pomiarów kinetycznych reakcji testowej", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.54 [ISBN 83-920331-2-4]
205. P. Warszyński "Some Dynamic Aspects of Surfactants and Colloid's Adsorption", Book of Abstracts.19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005, p.29
206. A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka membran samonośnych na bazie zeolitów MFI", Book of Abstracts, Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.385 [ISBN 83-920331-2-4]
207. M. Witko "Theoretical Studies on Heterogeneity of Surfaces of Oxide-Based Catalysts", Mater. Symp. on the Role of Vacancies, Disorder, and the Relationship between Surfaces and Bulk Structure in Selective Oxidation Catalysis, Irsee 2005
208. M. Witko, R. Gryboś "Influence on Alkali Dopants on V₂O₅. DFT Cluster Model Studies", Book of Abstracts. Deutsche Physikalische Gesellschaft, Berlin 2005, p.473
209. M. Witko, P. Hejduk "Teoretyczne badania powierzchni katalizatorów", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S6-W5 [ISBN 83-89936-07-0]

210. M. Witko, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel "Computational Studies on Nitric Oxide Interactions with Heme and Cobalamins" Conf. Proc. 7th Congr. of the World Association of Theoretically Oriented Chemists, (eds. C. Esterhuysen et al.), Cape Town, 2005, p.150
211. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "DFT Description of Oxygen Activation at Molybdenum Oxide Surface and Molybdenum Porphyrins", Book of Abstracts, ISHHC 12th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, (eds. V. Dal Santo et al.), Edizioni Tassinari, Firenze 2005, p.72 [ISBN 88-87057-34-6]
212. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś "Heterogeneity of Surface of Oxide-Based Catalysts. Cluster DFT Studies", Conf. Proc. 7th Congr. of the World Association of Theoretically Oriented Chemists, (eds. C. Esterhuysen et al.), Cape Town, 2005, p.39
213. W. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Electronic and Geometric Structure of Some Mesogenic Molecular Complexes", Abstracts, 16th CLC, Stare Jabłonki 2005, p.33
214. E. Włoch, M. Lekka, B. Żmudzińska-Żurek, Z. Żurek, B. Sulikowski "Czy adhezja kryształów do podłoża decyduje o wielkości pokrycia warstw ferrierytowych na podłożach metalowych syntezowanych metodą in-situ?", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.344 [ISBN 83-920331-2-4]
215. W. Włodarczyk, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, A. Michalik, E. M. Serwicka "Pd and/or Cr-Doped Zr-Pillared Montmorillonite Catalysts for Complete Combustion of Chlorinated Hydrocarbons", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.275
216. W. Włodarczyk, A. Gawęł, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Podpierane montmorillonity jako katalizatory w procesach oczyszczania powietrza z par toksycznych rozpuszczalników", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.39 [ISBN 83-920331-2-4]
217. W. Włodarczyk, A. Gawęł, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka, K. Bahranowski "Katalizatory montmorillonitowe do oczyszczania powietrza z lotnych chlorowcopochodnych organicznych (CVOC)", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S8-P121 [ISBN 83-89936-07-0]
218. Yu. P. Zaitsev, V. M. Lukyanchuk, D. V. Brazhnyk, V. A. Zazhigalov, A. Kowal, M. Mikołajczyk "Catalytic Properties Co/carbon cCatalysts in CO Oxidation in Hydrogen-rich Mixtures", Proc. 4th Int. Conf. on Environmental Catalysis, Heidelberg 2005, p.240
219. M. Zając, T. Ślęzak, N. Spiridis, W. Karaś, M. Ślęzak, J. Korecki "Magnetic Properties of Fe₃O₄ Films on Fe(001)", Mater. MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005, p.7-8

220. M. Zając, K. Freindl, N. Spiridis, M. Ślęzak, W. Karaś, T. Ślęzak, J. Korecki "Suppression of Superparamagnetism in Ultrathin Epitaxial Magnetite Films", Mater. 23rd European Conf. on Surface Science, Berlin 2005, p 298
221. M. Zając, K. Freindl, N. Spiridis, M. Ślęzak, W. Karaś, T. Ślęzak, J. Korecki "Suppression of Superparamagnetism in Ultrathin Epitaxial Magnetite Films", Mater. Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005, p.40
222. R. Zalecki, A. Kołodziejczyk, A. Kozłowski, J. Korecki, N. Spiridis, Z. Kąkol "Electronic States of Magnetite from Photoemission Spectroscopy ARUPS", Phys. Stat. Sol. B
223. J. Zawała, M. Krasowska, H. Hristova, K. Małyśa, D. Exerova "Influence of BSA Concentration on Acceleration, Velocity and Shape Pulsations of the Rising Bubble", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S5-P102 [ISBN 83-89936-07-0]
224. J. Zawała, M. Krzan, M. Krasowska, K. Małyśa "Influence of the Molecular Structure of Surfactant on Bubble Local Velocities", Book of Abstracts. 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
225. J. Zawała, K. Świąch, K. Małyśa "Simple and Non-expensive Method of Detection of Organic Contaminations in Water Based on Monitoring of the Bubble Rising Velocity", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S8-K2 [ISBN 83-89936-07-0]
226. V. Zazhigalov, J. Stoch, A. Kowal, M. Mikołajczyk, S. Kirilov, I. Romanova "Aktywność katalizatorów Cu-Ce-O w utlenianiu tlenku węgla", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, I KiFP PAN, Kraków 2005, p.154 [ISBN 83-920331-2-4]
227. V. Zazhigalov, J. Stoch, A. Kowal, M. Mikołajczyk, J. Podobiński "Activity of Ce-Cu-O Catalysts in Carbon Monoxide Oxidation" Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), I KiFP PAN, Kraków 2005, p.63 [ISBN 83-920331-7-5]
228. V. Zazhigalov, Y. Zaitsev, D. Brazhnyk, I. Bacherikova, J. Stoch, A. Kowal, V. Strelko "The Peculiarities of H₂S and CO Oxidation on Carbon Catalysts Containing Nanoclusters of Vanadium and Cobalt Oxides on Their Surface", Proc. Int. Conf. on Carbon, Gyeongju 2005, p.122-123
229. A. Zikánova, P. Hrabánek, L. Brabec, K. Kovandová, M. Kočřík, B. Bernauer, V. Krystl, M. Derewiński "Transport Related Texture Characteristics of Composite Zeolite based Membranes", Book of Abstracts, Int. Symp. "Catalytic Processes on Advanced Micro- and Mesoporous Materials", Nessebar 2005, p.75

230. M. Zimowska, M. Bazarnik, K. Bahranowski, A. Michalik, E. M. Serwicka, Z. Olejniczak "Synteza i właściwości strukturalne aluminowanych mezoporowatych sit molekularnych typu FSM", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.347 [ISBN 83-920331-2-4]
231. M. Zimowska, J. Camra, B. Borzęcka-Prokop, J. Wagner, J. Dziejczak, M. Najbar "Ewolucja powierzchni katalizatora 2% wag. Rh/Al₂O₃, otrzymanego metodą zol-żel, w czasie obróbki termicznej w warunkach utleniających i redukujących", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.349 [ISBN 83-920331-2-4]
232. M. Zimowska, R. Dula, A. Michalik, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Cu-Mo Oxides Derived from Layered Inorganic Precursors as Catalysts for the Complete Oxidation of Toluene", Book of Abstracts. 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005, p.284
233. M. Zimowska, R. Dula, R. Janik, A. Michalik, T. Machej, E. M. Serwicka "Układy typu mieszanych tlenków Cu-Mn jako katalizatory w reakcji całkowitego spalania toluenu", Mater. 37. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, IkiFP PAN, Kraków 2005, p.213 [ISBN 83-920331-2-4]
234. M. Zimowska, A. Michalik, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Catalytic Combustion of Toluene over Mixed Cu-Mn Oxides", Book of Extended Abstracts. Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005, ZK PAN, Gliwice 2005, p.219-220 [ISBN 83-916351-2-0]
235. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Cu-Mn Mixed Oxide Systems for Removal of VOCs: from Precursors to Catalysts", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.64 [ISBN 83-920331-7-5]
236. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, I. Stefanowicz-Pięta, R. Janik, T. Machej, Z. Czula, E. M. Serwicka "Highly Efficient Cu-Mn Mixed Oxide Catalysts for Total Oxidation of Toluene", Mater. Zjazdowe. 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005, Betagraf, Poznań 2005, paper S8-P57 [ISBN 83-89936-07-0]
237. M. Zimowska, J. Połtowicz, E. M. Serwicka, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Olejniczak "Aluminated FSM Mesoporous Silicas – Synthesis, Characterisation and Use as Supports for Organometallic Macrocycles", Mater. Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005, (eds. P. Hejduk et al.), IkiFP PAN, Kraków 2005, p.45 [ISBN 83-920331-7-5]

PRACE W DRUKU

1. Z. Adamczyk, "Particles at Interfaces (Interactions, Deposition, Structure)", Elsevier 2005-2006. pp.1-750 (in print)
2. E. Broclawik, A. Góra, P. Liguziński, P. Petelenz, H. A. Witek "Quantum Chemical TDDFT Modelling of Electrochromism of WO₃ Films", J. Chem. Phys.
3. D. V. Brazhnyk, Y. P. Zaitsev, V. A. Zazhigalov, I. V. Bachrikova, A. Kowal, J. Stoch "H₂S Oxidation of Vanadium Containing Carbons", Dokl. NANU
4. D. V. Brazhnyk, Yu. P. Zaitsev, I. V. Bacherikova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, M. Mikolajczyk, A. Kowal "Catalytic Oxidation of Low Concentration of Hydrogen Sulphid on Activated cCarbon KAU and V/KAU Catalysts", Appl. Catal. A
5. M. Derewiński, P. Sarv, A. Mifsud "Thermal Stability and Siting of Aluminum in Isostructural ZSM-22 and Theta-1 Zeolites", Catal. Today
6. R. Dula, R. Janik, T. Machej, P. Olszewski, J. Stoch, E. M. Serwicka "New Mn-Containing Catalytic Materials for the Total Combustion of Toluene", Catal. Today
7. S. Dźwigaj, I. Gressel, B. Grzybowska, K. Samson "Oxidative Dehydrogenation of Propane on VSiβ Catalysts", Catal. Today
8. R. Grabowski "Kinetics of Oxidative Dehydrogenation of C₂-C₄ Alkanes on Oxide Catalysts", Catal. Rev.- Sci. Eng.
9. R. Grabowski "Kinetics of the Propane Oxidative Dehydrogenation on Vanadia/ceria and Vanadia/ceria Doped by Potassium Catalysts", Polish J. Chem.
10. A. J. Groszek, E. Lalik, M. Ruszel, J. Haber, M. Gasior "Argon Enhancing the Catalytic Activity of Au-Based Catalysts", Langmuir
11. B. Grzybowska-Świerkosz "Nano-Au/oxide Support Catalysts in Oxidation Reactions: Provenance of Active Oxygen Species", Catal. Today
12. J. Haber "Fundamentals of Hydrocarbon Oxidation", in "Handbook of Catalysis", 2nd edition, Wiley Interscience
13. B. Jachimska, Z. Adamczyk "Characterization of Rheological Properties of Colloid Zirconia", J. European Ceramic Soc.
14. E. Jarek, P. Wydro, P. Warszyński, M. Paluch "Surface Properties of Mixtures of Surface-Active Sugar Derivatives with Ionic Surfactants: Theoretical and Experimental Investigations", J. Colloids Interface Sci.,
15. Y. Jiang, W. Wang, V. R. Reddy Marthala, J. Huang, B. Sulikowski, M. Hunger "Effect of Impurities on the Initiation of the Methanol-to-Olefin (MTO) Process by Surface Methoxy Groups", J. Catal.

16. J. Jiao, W. Wang, B. Sulikowski, J. Weitkamp, M. Hunger "²⁹Si and ²⁷Al MAS NMR Characterization of the Framework Composition of Non-hydrated Zeolite Catalysts upon Adsorption of Ammonia", *Micropor. Mesopor. Mater.*
17. M. Kępczyński, K. Nawalany, B. Jachimska, M. Romek, M. Nowakowska "Interaction of Porphyrin Covalently Attached to Poly(ethylene glycol) with Liposomal Membranes", *J. Phys. Chem. B*
18. A. Klisińska, I. Gressel, B. Grzybowska "Supported Vanadia Catalysts with Alkali and Alkaline Earth Additives in Oxidative Dehydrogenation of Propane. Part I. V₂O₅/SiO₂ System", *Polish J. Chem.*
19. A. Klisińska, I. Gressel, B. Grzybowska "Supported Vanadia Catalysts with Alkali and Alkaline Earth Additives in Oxidative Dehydrogenation of Propane. Part II. V₂O₅/MgO System", *Polish J. Chem.*
20. A. Klisińska, S. Loridant, B. Grzybowska, J. Stoch, I. Gressel "Effect of Additives on Properties of V₂O₅/SiO₂ and V₂O₅/MgO Catalysts. Part II. Structure and Physicochemical Properties of the Catalysts and Their Correlations with Oxidative Dehydrogenation of Propane and Ethane", *Appl. Catal.*
21. A. Klisińska, K. Samson, I. Gressel, B. Grzybowska "Effect of Additives on Properties of V₂O₅/SiO₂ and V₂O₅/MgO Catalysts. Part I. Oxidative Dehydrogenation of Propane and Ethane" *Appl. Catal.*
22. A. Kowal, P. Olszewski, D. Tripković, R. Stevanović "Nanoscale Topography of GC/Pt-C and GC/Pt-Ru-C Electrodes Studied by Means of STM, AFM and XRD Methods", *Materials Sci. Forum*
23. M. Krasowska, E. Hristova, Khr. Khristov, K. Małysa, D. Exerowa "Isoelectric State and Stability of Foam Films, Bubbles and Foams from PEO-PPO-PEO Triblock Copolymer (P-85)", *Colloid Polymer Sci.*,
24. M. Krzan, J. Zawala, K. Malysa "Development of Steady State Adsorption Distribution Over Interface of a Bubble Rising in Solutions of n-Alkanols (C₅, C₈) and n-Aalkyltrimethylammonium Bromides (C₈, C₁₂, C₁₆)", *Colloid Surf. A*
25. E. Lalik, R. Mirek, J. Rakoczy, A. Groszek "Microcalorimetric Study of Sorption of Water and Ethanol in Zeolites 3A and 5A", *Catal. Today*
26. K. Łątka, R. Kmiec, J. Gurgul, A. W. Pacyna, M. Rams, T. Schmidt, R. Pöttgen "Magnetic Ordering in NdRhSn", *J. Magn. Magn. Mater.*
27. A. Michna, Z. Adamczyk, M. Zembala "Deposition of Colloid Particles on Polyelectrolyte Multilayers", *Colloids Surf. A*
28. I. Nowak, M. Misiewicz, M. Ziółek, A. Kubacka, B. Sulikowski "Acid-base Properties of Oxide Systems Containing Niobium and Gallium", *Annals Polish Chem. Soc.*

29. A. Pacuła, E. Bielańska, A. Gaweł, K. Bahranowski, E. M. Serwicka "Textural Effects in Powdered Montmorillonite Induced by Freeze-Drying and Ultrasound Pretreatment", *Appl. Clay Sci.*,
30. J. Poltowicz, K. Pamin, L. Matachowski, E. M. Serwicka, R. Mokaya, Y. Xia "Oxidation of Cyclooctane over Mn(TMPyP) Porphyrin-Exchanged Al,Si-Mesoporous Molecular Sieves of MCM-41 and SBA-15 Type", *Catal. Today*
31. J. Poltowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber, A. Adamski, Z. Sojka "Metallosalen Complexes Immobilized in Zeolite NaX as Catalysts of Aerobic Oxidation of Cyclooctane", *Appl. Catal.*
32. N. N. Pozdnyakova, J. Rodakiewicz-Nowak, O. V. Turkovskaya, J. Haber "Oxidative Degradation of Polyaromatic Hydrocarbons Catalyzed by Blue Laccase from *Pleurotus ostreatus* D1 in the Presence of Synthetic Mediators", *Appl. Microb. Biotechnol.*
33. N. N. Pozdnyakova, O. V. Turkovskaya, E. N. Yudina, J. Rodakiewicz-Nowak "Zheltaya lakaza *Pleurotus ostreatus* D1: ochistka i kharakteristika" (Russian), *Appl. Biochem. Microb.*
34. J. Poźniczek, A. Lubańska, A. Micek-Ilnicka, D. Mucha, E. Lalik, A. Bielański "TiO₂ and SiO₂ Supported Wells-Dawson Heteropolyacid H₆P₂W₁₈O₆₂ as the Catalyst for ETBE Formation", *Appl. Catal. A*,
35. D. Prasetyoko, S. Endud, H. Hamdan, Z. Ramli, B. Sulikowski "The Transformation of Rice Husk Ash to Zeolite Beta", *Waste Management*
36. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Part 2. Catalytic Properties of Dealuminated Ferrierite-type Zeolite Studied in Transformations of Alkylaromatic Hydrocarbons", *Catal. Today*
37. M. Ruszel, B. Grzybowska, K. Samson, I. Gressel, A. Klisińska "M^{II}Cr₂O₄ – Spinel as Supports for Au Nanoparticles in Oxidation of CO", *Catal. Today*
38. J. Słoczyński, R. Grabowski, P. Olszewski, A. Kozłowska, J. Stoch, M. Lachowska, J. Skrzypek "Effect of Metal Oxide Additives on Activity and Stability of Cu/ZnO/ZrO₂ Catalysts in the Synthesis of Methanol from CO₂ and H₂", *Appl. Catal. A*
39. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Osadzanie modelowych mikrokapsulek na modyfikowanej powierzchni stali chirurgicznej", *Annals Polish Chem. Soc.*
40. E. Włoch, A. Łukaszczyk, M. Homa, Z. Żurek, B. Sulikowski "Synthesis of Ferrierite Coatings on the Fe-Cr-Al Substrates", *Catal. Today*
41. V. A. Zazhigalov, E. V. Cheburiakova, M. Gašior, J. Stoch "Mechanism of Phthalic Anhydride Formation on n-Pentane Oxidation at Presence of Vanadium Phosphorus Oxide Catalysis", *Kinet. Katal.*

42. V. A. Zazhigalov, Yu. P. Zaitsev, S. B. Grinenko, J. Stoch, A. Kowal, J. Podobiński "Preparation of Vanadium Oxide Nano-clusters in SiO₂-matrix and Their Catalytic Activity in Methane and Benzene Partial Oxidation", Catal. Today
43. A. Zikánova, M. Derewiński, P. Sarv, P. Hudec, P. Hrabánek, M. Kočířik "The Effect of Immobilization/mobilization Processes on the Temperature Onset of a Catalyst Bed Production Studied by Ethylene Oligomerization over HZSM-5 Zeolites", Catal. Today
44. M. Zimowska, A. Michalik, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Catalytic Combustion of Toluene over Mixed Cu-Mn Oxides", Catal. Today

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. B. Grzybowska-Świerkosz "Heterogeneous Catalysis: Fundamentals, Catalysts and Mechanisms of Main Reactions, Lecture notes for students of International Postgraduate School", (ed. I. Gressel), IkiFP PAN, Kraków 2005, pp.191 [ISBN 83-920331-5-9]
2. "Bulletin of CatColl Centre of Excellence. Lecture Notes 3", (ed. L. Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, pp.120 [ISBN 83-920331-3-2]
3. "Bulletin of CatColl Centre of Excellence, Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Lecture Notes 4", (eds. P. Hejduk, M. Szalaniec), IkiFP PAN, Kraków 2005, pp.294 [ISBN 83-920331-8-3]
4. "Bulletin of CatColl Centre of Excellence. Lecture Notes of International Symposium Particles and Polyelectrolytes at Interfaces, Lecture Notes 5", (ed. L. Szyk-Warszyńska), IkiFP PAN, Kraków 2005, pp.354 [ISBN 83-920331-6-7]
5. "Book of Abstracts. International Symposium Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", IkiFP PAN, Krakow 2005, pp.73 [ISBN 83-929331-4-0]
6. "Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities", (eds. P. Hejduk, M. Ruszel, M. Szalaniec), IkiFP PAN, Kraków 2005, pp.82 [ISBN 83-920331-7-5]
7. "Mater. XXXVII Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego", (ed. A. Kubacka), IkiFP PAN, Kraków 2005, pp.294 [ISBN 83-920331-2-4]

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

PATENTY OTRZYMANE

1. A. Smirnov, A. Popov, O. Borsukov, M. Derewiński, F. Faula, I. Ivanova "Catalyst and Process for the Production of High-octane Fuel and LPG", Patent Federacji Rosyjskiej, RU 2243820 (2005)
2. V. A. Zazhigalov, J. Haber, J. Stoch, A. I. Kharlamov, I. V. Bacherikova "Sposób wytwarzania katalizatora wanadowo-tytanowego do utleniania o-ksylenu do bezwodnika ftalowego", Patent RP, wg zgłoszenia P-332844 (udzielony 2005)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

1. A. J. Groszek, J. Haber, E. Lalik "Preparation of a Catalyst", Int. PTC Patent Application N° PCT/GB2005/002212 (2005)

UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

WYKŁADY PLENARNE I NA ZAPROSZENIE

1. Z. Adamczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek "Irreversible Adsorption – Kinetic and Structural Aspects", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
2. Z. Adamczyk "Adsorption on Surfaces with Controlled Heterogeneity", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Dispersed Systems, Lublin 2005
3. A. Bielański, A. Lubańska, A. Micek-Ilnicka, J. Poźniczek "Catalytic Synthesis of Tertiary Ethers on Heteropolyacids", 16th Cracow-Jena Seminar on Physical Chemistry, Jena 2005
4. E. Broclawik, "Iron Sites in CYP450 Enzymes: Quantum Chemical DFT Modeling", 16th Cracow-Jena Seminar on Physical Chemistry, Jena 2005
5. A. Chumakov, P. T. Jochym, J. Korecki, J. Lazewski, K. Parliński, R. Röhlberger, R. Rüffer, B. Sepioł, M. Sladeczek, T. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, G. Vogl "Nano-scale Systems: Dynamics", Symp. on Nuclear Resonant Scattering, ESRF, Grenoble 2005
6. A. Chumakov, P. T. Jochym, J. Korecki, J. Lazewski, K. Parliński, R. Röhlberger, R. Rüffer, B. Sepioł, M. Sladeczek, T. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, G. Vogl "Vibrational Density of States in Ultrathin Fe Films on W(110) from Nuclear Inelastic Scattering of Synchrotron Radiation", 23rd European Conf. on Surface Science, Berlin 2005
7. M. Derewiński "Not Only Breck Award", "Donald W. Breck Award" for Professor A. Corma Conf., Instituto de Tecnologia Quimica UPV-CSIC, Valencia 2005
8. B. Grzybowska-Świerkosz "Nano-Au/oxide Support Catalysts in Oxidation Reactions: Provenance of Active Oxygen Species", 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005
9. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Oxide Catalysts: What We Know, and What We Would Like to Know", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
10. J. Haber "Electronic Factor in Heterogeneous Catalytic Oxidation Revisited", 5th World Congr. on Oxidation Catalysis, Sapporo 2005
11. B. Jachimska "Metoda Dynamicznego Rozpraszania Światła (DLS), czyli jak odkryć świat koloidów"6. Studenckie Spotkania Analityczne, Kraków 2005

12. J. Korecki "Epitaxial Nanostructures – Characterization and Growth", MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005
13. J. Korecki "Dynamics in Nano-scale Materials Studied with Synchrotron Radiation", Science and Art in Europe, session 'Catalysis: Nanotechnology with a Past', Berlin 2005
14. J. Korecki, A. Chumakov, P. T. Jochym, J. Lazewski, K. Parliński, R. Röhlberger, R. Rüffer, B. Sepioł, M. Sladeczek, T. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, G. Vogl "Studying Nanostructures with Nuclear Resonance Scattering of Synchrotron Radiation", Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005
15. A. Kowal, J. Czyżniewska, L. Pavlovic, M. Pavlovic, C. Gutierrez "Ti/SnO₂(Sb) Electrodes Used for Decomposition of Organic Pollutants in Water", Symposium 'Wodowody i Kanalizacja', Herzeg Novi 2005
16. W. Kraus "'Chemia i Inżynieria Ekologiczna' – Material for Bibliometric Rating of the Journal", 10th Int. Scientific Conf. Metal Ions and Other Abiotic Factors in the Environment, Krakow 2005
17. T. Machej "Current Trends in Development of Catalysts for VOC Emission Abatement", Konf. 'Emise organických látek z technologických procesů a metody jejich snižování', Pardubice 2005
18. T. Machej "Catalytic System – SWINGTHERM", Konf. 'Emise organických látek z technologických procesů a metody jejich snižování', Pardubice 2005
19. W. Rudziński, T. Pańczyk "Quantative Analysis of the Thermodesorption Spectra from Catalyst Surface Based on the Statistical Rate Theory Approach", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
20. E. M. Serwicka "Mesoporous Molecular Sieves as Hosts for Catalytically Active Organometallic Macrocycles", Science and Art in Europe, session 'Catalysis: Nanotechnology with a Past', Berlin 2005
21. R. Tokarz-Sobieraj "DFT Cluster Model Studies of Molybdenum Based Catalysts", 1st Int. Symp. on Methods and Applications of Computational Chemistry, Kharkiv 2005
22. R. Tokarz-Sobieraj "DFT Description of Molybdenum Based Catalysts", CatColl Meeting and SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków 2005
23. P. Warszyński "Adsorption of Surfactants; Route from Molecular Modeling to Adsorption Isotherms", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
24. P. Warszyński "Some Dynamic Aspects of Surfactants and Colloid's Adsorption", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005

25. M. Witko, P. Hejduk "Teoretyczne badania powierzchni katalizatorów", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
26. M. Witko "Surface Modification of Oxide Catalysts – Quantum Chemical Modeling", Conf. Catalysis and Adsorption in Fuel Processing and Environmental Protection, Kudowa-Zdrój 2005
27. M. Witko "Theoretical Studies on Heterogeneity of Surfaces of Oxide-Based Catalysts", Symp. on the Role of Vacancies, Disorder, and the Relationship between Surfaces and Bulk Structure in Selective Oxidation Catalysis, Irsee 2005
28. M. Witko "Theoretical Studies on Heterogeneity of Oxide Surfaces", Science and Art in Europe, session 'Catalysis: Nanotechnology with a Past', Berlin 2005
29. M. Witko "Oxygen at V₂O₅ Surface – Quantum Chemical Studies", 2nd Concorde Workshop In situ Characterization and Modeling of Oxide Catalysts", Belfast 2005
30. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś "Heterogeneity of Surface of Oxide-Based Catalysts. Cluster DFT Studies", 7th Congr. of the World Association of Theoretically Oriented Chemists, Cape Town 2005

REFERATY I KOMUNIKATY

1. Z. Adamczyk "Understanding Hetero System (Adsorption): Can It Be Achieved?", Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005
2. Z. Adamczyk "Colloids for Targeted Drug Delivery", 'NanoDrugs' Consortium Meeting, Athens 2005
3. Z. Adamczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek "Irreversible Adsorption – Kinetic and Structural Aspects", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
4. Z. Adamczyk, A. Michna, P. Warszyński, M. Zembala "Polyelectrolyte Multilayer Probing by Streaming Potential and Particle Deposition Measurements – New Data and New Problems", Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005
5. G. Adamski, Ł. Bratasz, N. Mayr, D. Mucha, R. Kozłowski, M. Stilhammerova, J. Weber "Roman Cement – Key Historic Material to Cover the Exteriors of Buildings", RILEM, TC 203-RHM: "Repair mortars for historic masonry", Delft 2005
6. J. Barbasz, N. Spiridis, J. Korecki "Wpływ terminacji powierzchni Fe₃O₄(001) na adsorpcję złota", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
7. W. Barzyk "Electric Surface Potential Study of Orientation Changes in Monolayers at the Air/solution Interface", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005

8. M. Bazarnik, M. Zimowska, E. Serwicka, K. Bahranowski, A. Gaweł, Z. Olejniczak "Syntetyczny kanemit jako prekursor mezoporowatych materiałów krzemionkowych", 6. Międzynarodowa Konf. Doktorantów i Młodych Pracowników Nauki, Miękinia-Herlany 2005
9. A. Bielański, A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska "Solid Heteropolyacids as the Catalysts for Alcohol to Olefin Addition (Case Study)", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
10. Ł. Bratasz, S. Jakiela, R. Kozłowski "Allowable Thresholds in Dynamic Changes of Microclimate for Wooden Cultural Objects: Monitoring in-situ and Modelling", 4th Triennial Meeting ICOM Committee for Conservation, The Hague 2005
11. A. Bratek, Z. Adamczyk, B. Jachimska "Wpływ siły jonowej na lepkość roztworów polielektrolitów", SURUZ Cluster Meeting, Pawłowice-Wrocław 2005
12. A. Bratek, Z. Adamczyk, B. Jachimska "Wpływ pH i siły jonowej na lepkość roztworów polielektrolitów", Mikrosymposium "Stabilność układów dyspersyjnych", 48. Zjazd PTChem i SITChem, Poznań 2005
13. A. Bratek, Z. Adamczyk, B. Jachimska "Determining the Structure of Polyelectrolytes by Dynamic Viscosity Measurements", SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków 2005
14. E. Broclawik "Reaction Mechanism for the Metabolism of Antimigraine Drugs on Iron Site in Cytochrome P450 Enzymes: A DFT Study", Workshop on Modeling Interactions in Biomolecules, Prague 2005
15. E. Broclawik, K. Chiba, Y. Sasaki, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, K. Akutsu, M. Hirota, M. Kitada, H. Hirata, A. Miyamoto "First-Principles and Tight Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to Vibrationally Excited States Dynamics of Water", 229th American Chem. Soc. National Meeting, San Diego 2005
16. E. Broclawik, A. Rajjak Shaikh, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, A. Miyamoto "Metabolism of Arene Substrates on Iron Site in Cytochrome P450: Quantum Chemical DFT Modeling", Int. Conf. of Computational Methods in Sciences and Engineering, Loutraki 2005
17. N. Carmona, A. Kowal, J. Rincon, M. Villegas "AFM Assessment of the Superficial Nano/microstructure on Chemically Damaged Historical and Model Glasses", 10th EuCheMS, Rimini 2005
18. S. Cohen-Addad, R. Höhler, M. Krzan, M. Marinic, B. Herzhaft "Rigidity Percolation in Particle Laden Foams", 58th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, American Physical Soc., Chicago 2005
19. C. Dejuguant, G. Para, P. Warszyński "Preparation of PAH/PSS Microcapsules by Membrane Emulsification", Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005

20. M. Derewiński, K. Góra-Marek, P. Sarv, J. Datka "Relationship between Thermal Stability and Acidity of Mesoporous Alumina and Aluminosilicates", 21^{eme} Réunion du GFZ, Sevrier 2005
21. R. Dula, R. Janik, T. Machej, P. Olszewski, J. Stoch, E. M. Serwicka "Hydrotalcite-derived Mn-Containing Mixed Oxides as Catalysts for Removal of VOCs", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
22. R. Dula, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka, J. Stoch "New Mn-Containing Catalytic Materials for the Total Combustion of Toluene", Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005
23. P. Dyshlovenko, P. Warszyński "Numerical Study of Electrostatic Colloidal Interaction at Charged Interface", Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005
24. S. Dźwigaj, I. Gressel, B. Grzybowska, K. Samson "Oxidative Dehydrogenation of Propane on VSi β Catalysts", 12. Forum Zeolitowe, Ciężen 2005
25. K. Freindl, N. Spiridis, T. Ślęzak, M. Zając, W. Karas, J. Korecki "Hyperfine Fields in Nano-dispersed Magnetite", MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005
26. A. Gomułczak, K. Wieczorek-Ciurowa, J. Rakoczy, J. Stoch "Ocena skutków mechanicznej aktywacji tlenków V $_2$ O $_5$ -Cr $_2$ O $_3$ jako prekursorów katalitycznych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
27. R. Grabowski "Modelowanie kinetyki utleniającego odwodornienia alkanów na katalizatorach wanadowych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
28. R. Gryboś, M. Witko "Vanadium Oxide on Anatase Surface. Theoreticians View", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
29. J. Haber, J. Janas, J. Kryściak, T. Machej, H. Sadowska "The Role of Support in Catalysts for Oxidation of Nitromethane", Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005
30. J. Haber, J. Stoch, V. A. Zazhigalov "Transition Metal Promoted VPO Catalysts in Selective Oxidation of Propane, n-Butane and n-Pentane", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
31. P. Hejduk, M. Witko, K. Hermann "Kwantowo-chemiczne badania struktury elektronowej niewysyczonej powierzchni V $_2$ O $_5$ (001)", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005

32. P. Hejduk, M. Witko, K. Hermann "Theoretical Approach to Investigate Into Active Sites at Undercoordinated Vanadium Oxide Surfaces by Hydrogen: Ab initio DFT Cluster Studies for V_2O_5 (001)", 2nd Int. School - Conference on Catalysts Design for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005
33. P. Hejduk, M. Witko, K. Hermann "Hydrogen Adsorption at V_2O_5 : DFT Cluster Studies for Saturated and Unsaturated Surfaces", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
34. S. Jakięła, K. Cieřlar, Z. Olejniczak, Ł. Bratasz "Measurement of Moisture Transport in Wood Using Low Field 1D-MRI", 38. Ogólnopolskie Seminarium na Temat Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2005
35. E. Jarek, P. Wydro, M. Paluch, P. Warszyński "Surface Properties of Mixtures of Surface Active Sugar Derivatives with Ionic Surfactants. Theoretical and experimental investigations", SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków 2005
36. T. Jasiński, P. Warszyński "Molecular Mechanics Simulations of Adsorption of Single Hydrocarbon Chain Surfactants at the Air/water Interface", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Dispersed Systems, Lublin 2005
37. T. Jasiński, P. Warszyński "Molecular Mechanics Simulations of Adsorption of Single Hydrocarbon Chain Surfactants at Air/water Interface", Symp on Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Application, Wólka Milanowska 2005
38. K. Jaszczółt, Z. Adamczyk, B. Siwek "Surface Clusters of Colloid Particles Produced by Deposition on Sites", Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005
39. V. Jovanović, A. Kowal "Characterization of Silver Particles Spontaneously Deposited on Glassy Carbon", YUCOMAT 2005, Herzeg Novi 2005
40. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The Opposite Effects of Potassium Additive on the Catalytic Performance in Oxidative Dehydrogenation of C_2 - C_4 Alkanes over VO_x /Oxide Support Catalysts", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
41. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The Positive and Negative Effects of Potassium Additive on Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Lower Alkanes on VO_x /oxide Supports Satalysts", 2nd Int. School - Conference on Catalysis for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005
42. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Transformacja mezo- i makroporowatych glinokrzemianów zeolitowych materiały zawierające domeny mikrokrystaliczne zeolitu Y", 12. Forum Zeolitowe, Ciężęń 2005
43. M. Kolasińska, P. Nowak, A. Trybała, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers: Comparison of PAH/PSS and Chitosan/Alginate Systems", Int. Symp. "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005

44. M. Kolasińska, R. Krastev, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolytes Multilayers, Effect of PEI Anchoring Layer and Post-treatment after Deposition", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005
45. M. Kolasińska, A. Trybała, P. Warszyński "Ellipsometric Study and Wetting Properties of Polyelectrolytes Multilayers. Comparison of PAH/PSS and Chitosan/Alginate Systems", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
46. M. Kolasińska, P. Warszyński "Properties of Polyelectrolyte Films Deposited on Macroscopic Surfaces", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Dispersed Systems, Lublin 2005
47. J. Korecki, N. Spiridis, T. Ślęzak, M. Zając, K. Freindl "Growth and Oxidation of Nanostructures at the Metal Oxide Interface", DYNASYNC Mid-term Assessment Meeting, Grenoble 2005
48. A. Kowal, P. Olszewski, D. Tripković, R. Stevanović "Nanoscale Topography of GC/Pt-C and GC/Pt-Ru-C Electrodes Studied by Means of STM, AFM and XRD Methods", YUCOMAT 2005, Herzeg Novi, 2005
49. M. Krasowska, K. Małyca "Role of Gas Presence at Hydrophobic Solid Surface in Formation of the Three-phase Contact", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
50. M. Krasowska, K. Małyca "Gas Nucleation and Formation of the Three Phase Contact at Hydrophobic Solid Surface by the Rising Bubble", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Dispersed Systems, Lublin 2005
51. M. Krzan, S. Cohen-Addad, R. Höhler "Rheology and Stability of Particle Laden Foams", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
52. M. Krzan, J. Zawala, M. Krasowska, K. Małyca "Bubble Motion as Method of Detection of Organic Contaminations in Water", Proc. 4th Int. Conf. "Oils and Environment" AUZO 2005, Gdańsk 2005
53. A. Kubacka, E. Włoch, Z. Olejniczak, V. Cortés Corberán, R. X. Valenzuela, A. Fuerte, B. Sulikowski "Functionalisation of Propane on Mesoporous Molecular Sieves", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
54. M. Kubo, Y. Sasaki, K. Chiba, P. Qiang, S. A. Rajjak, H. Tsuboi, M. Koyama, E. Broclawik, K. Akutsu, M. Hirota, M. Kitada, H. Hirata, A. Miyamoto "Tight Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Approach to the Formation Dynamics of Hydrogen by the Chemical Reactions of Vibrationally Excited Water on Si Surfaces", 229th American Chem. Soc. National Meeting, San Diego 2005
55. K. Małyca "Scientific Network SURUZ – Aims and Current State", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005

56. K. Małyś "Dynamics of Bubble Collision with Different Interfaces", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Dispersed Systems, Lublin 2005
57. K. Małyś, M. Krzan, M. Krasowska "Dynamic Effects in Formation of the Dispersed Systems", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
58. P. Nowak, R. P. Socha "Metal Sulfides' Oxidation in Flotation Wastes – the Fate of Sulfide Sulfur", Konf. Fizykochemiczne Problemy Mineralurgii, Wisła 2005
59. A. Pacuła, K. Pamin, A. Kozłowska, J. Komorek, E. M. Serwicka "Montmorillonit – naturalny minerał warstwowy jako nośnik heteropolikwasów", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
60. A. Pacuła, K. Pamin, J. Kryściak-Czerwenka, Z. Olejniczak, R. Dula "Montmorillonite as Supports for Heteropolyacids", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
61. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Cycloalkanes Oxidation with Molecular Oxygen Catalysed by Encapsulated Metallosalen Complexes", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
62. K. Pamin, J. Połtowicz, E. Tabor, J. Haber "Cycloalkanes Oxidation with Molecular Oxygen Catalyzed by Encapsulated Metallosalen Complexes", Séminaire Hors-Ville en Chimie 1, Villars sur Ollon 2005
63. K. Pamin, J. Połtowicz, D. Mucha, J. Haber "Effect of Cobalt Counter-cation on Catalytic Properties of Tungstophosphoric and Molybdophosphoric Acids", 48. Zjazd PTChem i SITChem, Poznań 2005
64. T. Pańczyk, W. Rudziński "Współczynnik przyklejenia w świetle Statystycznej Teorii Transportu Międzyfazowego", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
65. G. Para, E. Jarek, P. Warszyński "Hofmeister Series Effects in Adsorption of n-Alkyl Trimethyl Ammonium Bromide Cationic Surfactants at Fluid Interfaces", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005
66. G. Para, E. Jarek, P. Warszyński "Hofmeister Series of Anions and Adsorption Cationic Surfactants at Fluid Interfaces", 3rd Thermodynamics Polish-French Days, Carry le Rouet 2005
67. K. Parliński, P. T. Jochym, J. Lazewski, A. M. Oleś, P. Piekarczyk, M. Sternik, J. Korecki "Ab initio Phonon Calculations on Multilayers, Crystal Surfaces and Crystals with Heavy Elements", PSIK 2005, Schwäbisch Gmünd 2005
68. J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Fluorous Biphasic Catalysis-Macrocyclic Complexes with Fluorous Ponytails as Catalysts in Epoxidation of Alkenes", Séminaire Hors-Ville en Chimie 1, Villars sur Ollon 2005

69. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Pernitrometalloporphyrins with Fluorous Ponytails as Catalysts in Epoxidation of Alkenes", Int. Symp. on Fluorous Technologies, Bordeaux 2005
70. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Fluorowa kataliza dwufazowa – Metaloporfiryryny kobaltu jako katalizatory epoksydacji olefin", 48. Zjazd PTChem i SITChem, Poznań 2005
71. A. Pomianowski "Open Systems", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
72. J. Poźniczek, A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska, A. Bielański "Synteza ETBE na katalizatorach: $H_6P_2W_{18}O_{62} / TiO_2$ i $H_6P_2W_{18}O_{62} / SiO_2$ ", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
73. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Transformacje węglowodorów alkiloaromatycznych na modyfikowanych ferierytach", 12. Forum Zeolitowe, Ciężen 2005
74. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Właściwości katalityczne modyfikowanych ferierytów w procesach transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
75. S. A. Rajjak, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, K. Nishijima, T. Terasaki, A. Miyamoto "Interaction of Antimigraine Agents with Cytochrome P450 3A4: Modelling Biotransformation Reactions by Combined QM/MM Methods" 125th Annual Meeting of Pharmaceutical Society of Japan, Tokyo 2005
76. J. Rodakiewicz-Nowak "Biosensors – the Future of Medical Analysis", SURUZ Cluster Meeting, Pawłowice-Wrocław 2005
77. J. Rodakiewicz-Nowak "Catalytic Activity of Ligninolytic Enzymes in Water in Oil Microemulsions", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
78. M. Ruszel, B. Grzybowska, I. Gressel, A. Klisińska "Au/M^{II}Cr₂O₄ Spinels as Catalysts in Oxidation of CO and C₃ Hydrocarbons", 2nd Int. School - Conference on Catalysts Design for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005
79. M. Ruszel, B. Grzybowska, A. Palej, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Oxidation of CO and C₃H₆ on Au/Ti-SBA-15 Catalysts", 12. Forum Zeolitowe, Ciężen 2005
80. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, G. Stochel "DFT Studies on Ligand Binding Properties of Cobalamins", Workshop on Modeling Interactions in Biomolecules II, Prague 2005
81. P. Sarv, M. Derewiński, I. Heinmaa "Active Site Reinsertion and Redistribution in B,Al-Beta Zeolite Effected by Boron Removal", 3rd FEZA Conf. Prague 2005

82. E. M. Serwicka "Educational Opportunities in the Field of Catalysis in Poland", ACENET ERA-NET Meeting, Kraków 2005
83. C. Simon, P. Petitjean, J. Beylich, C. Dejugnant, G. Para, P. Warszyński "Preparation of PAH/PSS Microcapsules by Membrane Emulsification", Int. Symp. Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", Kraków 2005
84. N. Spiridis "Fe Growth on W(110)", DYNASYNC Meeting, Budapest 2005
85. N. Spiridis, J. Barbasz, K. Freindl, J. Korecki "Gold Adsorption on Fe₃O₄(001)", MDN & DYNASYNC Workshop on Dynamics in Nanoscale Systems, Raach am Hochgebirge 2005
86. M. Szaleniec, M. Menke, P. Nowak, J. Heider, M. Witko "Etylbenzene Dehydrogenase - Biocatalyst for the Hydroxylation of Ethylbenzene and Its Structural Analogues", 3rd Moscow Inter. Congr. on Biotechnology: State of the Art and Prospects of Development, Moscow 2005
87. M. Szaleniec, M. Menke, P. Nowak, J. Heider, M. Witko "Ethylbenzene Dehydrogenase - Enzymatic Hydroxylation of Ethylbenzene Derivates", Conf. on Catalysis and Biocatalysis in Green Chemistry, Cambridge 2005
88. J. Szaleniec, M. Modrzejewski, M. Szaleniec, W. Wszolek "Application of New Acoustic Parameters in ANN-Aided Pathological Speech Diagnosis", Conf. Speech Analysis, Synthesis and Recognition, Application of Phonetics, Krakow 2005
89. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, M. Kolasińska, P. Warszyński "Deposition of Model Micro-capsules with Polyelectrolyte Shells on Surface of Modified Surgical Steel", 3rd Thermodynamics Polish-French Days, Carry le Rouet 2005
90. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Wpływ struktury porfiryn kobaltowych na ich aktywność katalityczną w reakcji utlenienia cyklooktanu", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
91. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Influence of the Structure of Iron Porphyrins on Catalytic Activity in Oxidation of Hydrocarbons", 5th Int. School on Molecular Catalysis, Organic and Polymer Synthesis and Catalysis, Poznań-Rosnówko 2005
92. R. Tokarz-Sobieraj "Metoda DFT jako narzędzie badań przemian zachodzących w trakcie reakcji katalitycznej na powierzchni katalizatorów Mo-O", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
93. D. Tripković, A. Kowal, P. Olszewski "Nanoscale Topography of GC/Pt-C and GC/Pt-Ru-C Electrodes Studied by Means of STM, AFM and XRD Methods", 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
94. D. Tripković, S. Terzić, A. Tripković, A. Kowal, V. Jovanović "The Effect of Electrochemically Treated Classy Carbon on the Activity of Supported Pt Catalyst", 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005

95. A Trybała, L. Szyk-Warszyńska, E. Sambre, P. Warszyński "Deposition of Model Micro-capsules on Modified Surface of Surgical Stainless Steel", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
96. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Osadzanie modelowych mikrokapsulek na modyfikowanej powierzchni stali chirurgicznej", SURUZ Workshop, Poznań 2005
97. W. Turek, J. Haber, A. Krowiak "Ocena rodzajów centrówaktywnych na powierzchni katalizatorów na podstawie pomiarów kinetycznych reakcji testowej", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
98. P. Weroński "Limitations of Molecular Dynamics", Int. PACE-PAs Science Coordination Workshop, Los Alamos 2005
99. P. Weroński, J. Barbasz, Z. Adamczyk "Monte Carlo Random Sequential Adsorption Model in Studies of Multilayer Thin Film Formation", Symp. "Championing Scientific Careers", Los Alamos 2005
100. P. Weroński, Y. Jiang, S. Rasmussen "Molecular Dynamics Study of a Small PNA Molecule in a Lipid-Water System", Symp. "Championing Scientific Careers", Los Alamos 2005
101. P. Weroński, Y. Jiang, S. Rasmussen, "Molecular Dynamics Study of a Small PNA Molecule in a Lipid-Water System", Int. PACE-PAs Science Coordination Workshop, Los Alamos 2005
102. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "DFT Description of Oxygen Activation at Molybdenum Oxide Surface and Molybdenum Porphyrins", ISHHC 12th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Firenze 2005
103. W. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Electronic and Geometric Structure of Some Mesogenic Molecular Complexes", 16th CLC, Stare Jabłonki 2005
104. W. Włodarczyk, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, A. Michalik, E. M. Serwicka "Dotowany palladem i/lub chromem, podpierany cyrkonem montmorillonitowy kompozyt jako katalizator w procesach oczyszczania powietrza z chlorowanych węglowodorów alifatycznych", 6. Międzynarodowa Konf. Doktorantów i Młodych Pracowników Nauki, Miękinia-Herlany 2005
105. W. Włodarczyk, A. Gawęł, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Podpierane montmorillonity jako katalizatory w procesach oczyszczania powietrza z par toksycznych rozpuszczalników", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
106. P. Zarzycki, P. Szabelski, R. Charmas, "Weryfikacja mechanizmu powstawania ładunku na powierzchni Al₂O₃ będącego w kontakcie z roztworem elektrolitu przy wykorzystaniu analiz populacyjnych. Symulacje Monte Carlo adsorpcji jonów H⁺", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Disperse Systems, Lublin 2005

107. J. Zawala, M. Krzan, K. Małysa "Influence of Surfactant on Initial Accelerations, Shape and Velocity Variations of the Detaching Bubbles", Cluster A Meeting of SURUZ Network, Poznań 2005
108. J. Zawala, K. Święch, K. Małysa "Simple and Non-expensive Method of Detection of Organic Contaminations in Water Based on Monitoring of the Bubble Rising Velocity", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
109. M. Zimowska, J. Połtowicz, E. M. Serwicka, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Olejniczak "Aluminated FSM Mesoporous Silicas – Synthesis, Characterisation and Use as Supports for Organometallic Macrocycles", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
110. P. Zarzycki, P. Szabelski, R. Charmas "Weryfikacja mechanizmu powstawania ładunku na powierzchni Al_2O_3 będącego w kontakcie z roztworem elektrolitu przy wykorzystaniu analiz populacyjnych. Symulacje Monte Carlo adsorpcji jonów H^+ ", Symp. Interfacial Phenomena, Surfactants and Dispersed Systems, Lublin 2005

POSTERY

1. Z. Adamczyk, K. Jaszczółt, B. Siwek "Nieodwracalna adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
2. Z. Adamczyk, M. Zembala, A. Michna "Characterization of Polyelectrolyte Films by Colloid Particle Deposition and Streaming Potential Methods", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005
3. A. Adamski, Z. Sojka, E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "CW-EPR Studies of the Reactivity of Co-Salen-py and Co-Salen-py/Y Oxidation Catalysts", Mater. 9th Int. Workshop on EPR of Disordered Systems EMARDIS, Sofia 2005
4. A. Adamski, E. Tabor, Z. Sojka "Transformation of NO_x on Ceria-zirconia Surface in the Presence of Oxygen", Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005
5. W. Barzyk "Orientation/2-D-Phase Transitions in Soluble Monolayers at the Air/water Interface", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
6. W. Barzyk, E. Rogalska, S. Campagna "Penetration of Antimicrobial Peptides to Phospholipid Monolayers (DPPC or DPPG) Used as Model Biological Membranes", 18th Polish Peptide Symposium, Wrocław 2005
7. M. Bazarnik, K. Bahranowski, M. Zimowska, A. Michalik, E. M. Serwicka, Z. Olejniczak "Influence of Al Substitution on the Textural Properties of FSM Mesoporous Silicas", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
8. M. Bazarnik, M. Zimowska, Z. Olejniczak, E. Serwicka, K. Bahranowski "Dotowanie glinem mezoporowatych materiałów krzemionkowych typu FSM-16", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005

9. L. Brabec, A. Zikánova, M. Kočířik, A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Hydrothermal Synthesis of Zeolite Layers. Kinetics of Growth and Visualization of Grain Boundaries by HF-Etching", Int. Symp."Catalytic Processes on Advanced Micro- and Mesoporous Materials", Nessebar 2005
10. A. Bratek, Z. Adamczyk, B. Jachimska "Influence of pH and Ionic Strength on the Structure of Polyacrylic Acid (PAA) in Aqueous Solutions", 48. Zjazd PTChem i SITChem, Poznań 2005
11. D. V. Brazhnyk, Yu. P. Zaitsev, I. V. Bacherikova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch "Catalytic Oxidation of H₂S on Activated Carbon KAU", 4th Int. Conf. on Environmental Catalysis, Heidelberg 2005
12. D. V. Brazhnyk, Yu. Zaitsev, I. V. Bacherikova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, M. Mikołajczyk, A. Kowal "Catalytic Oxidation of Low Concentrations of H₂S on Activated Carbon KAU and V/KAU Catalysts", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
13. E. Broclawik, A. Góra, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, A. Miyamoto "Mechanism of Hydrogen Abstraction by O⁻ Species in ODH of Early Alkanes: Model Theoretical DFT Study", 95th Meeting of Catalysis Society of Japan, Tokyo 2005
14. E. Broclawik, P. Rejmak, P. Kozyra "DFT Quantum Chemical Modeling of the Interaction of Alkenes with Cu⁺ Sites in Zeolites", 3rd FEZA Conf., Prague 2005
15. E. Broclawik, R. Rejmak, P. Kozyra, J. Datka "Modelowanie kwantowochemiczne (DFT) oddziaływania alkenów z centrami Cu⁺ w zeolitach", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
16. A. Burkat, W. Kobyzewa, A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Synteza zawiesin koloidalnych nanokryształów zeolitów typu MFI (silikalit-1) oraz BEA", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
17. E. V. Cheburakova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, J. Haber "The n-Pentane Partial Oxidation and Catalysts for Its Realization", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
18. E. V. Cheburakova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, J. Haber "Modification of VPO Catalysts for Phtalic Anhydride Production", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
19. I. Czekał, C. Friedrich, P. Hejduk, C. Kolczewski, K. Hermann "Lokale und periodische Modelle zur geometrischen und elektronischen Struktur von Vanadiumoxidoberflächen", Sonderforschungsbereiches 546, Berlin 2005
20. M. Derewiński, K. Góra-Marek, P. Sarv, J. Datka "Relationship between Thermal Stability and Acidity of Mesoporous Alumina and Aluminosilicates.", 21^{eme} Réunion du GFZ, Sevrier 2005

21. R. Dula, I. Gressel, D. Mucha, E. M. Serwicka "Catalytic Activity of Mg-Ga-V Mixed Oxide Systems Obtained from LDH-Type Precursors in the ODH of Propane", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
22. R. Dula, I. Gressel, D. Mucha, E. M. Serwicka "Syntetyczne hydrotalkity magnezowo-galowe dotowane wanadem jako prekursorzy katalizatorów do utleniającego odwodornienia propanu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
23. R. Dula, D. Mucha, J. Stoch, E. M. Serwicka "Wpływ sposobu dotowania manganem na właściwości fizykochemiczne syntetycznych hydrotalkitów Mg-Al", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
24. R. Dula, P. Olszewski, E. M. Serwicka "Comparison of the Thermal Evolution of Layer- and Interlayer-manganese-doped Mg-Al Hydrotalcite-like Compounds", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
25. R. Dula, P. Olszewski, E. M. Serwicka "Wpływ substytucji galem na ewolucję termiczną syntetycznych hydrotalkitów typu Mg-Al interkalowanych anionami dekwawanadanowymi", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
26. R. Dula, J. Połtowicz, E. M. Serwicka "Aktywność katalityczna syntetycznych hydrotalkitów zawierających mangan w reakcji utleniania cykloheksenu tlenem molekularnym", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
27. S. Dźwigaj, J. Janas T. Machej, M. Che "Selective Catalytic Reduction of NO by Alcohols on Co and Fe Si β Catalysts", Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005
28. U. Filek, A. Mohamed, B. Sulikowski "Synteza mezoporowatych sit molekularnych typu SBA-15 i ich modyfikacja kwasem fosforowo-wolframowym", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
29. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Mechanism of Actin Polymerization by Myosin Subfragment-1 Probed by Dynamic Light Scattering", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
30. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Investigation of the Mechanism of Actin Polymerization Induced by Myosin Subfragment-1 Using Dynamic Light Scattering", 18th Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 3rd Spring Meeting on Bioelectrochemistry, Coimbra 2005
31. A. Gil, Z. Żurek, B. Sulikowski, A. Stawiarski, A. Kuc, J. Żurek "The Phase Transformation Caused by Corrosion Degradation of Ternary and Quaternary Gamma-TiAl-Based Alloys in SO₂ Atmosphere", Int. Conf. on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2005, Phoenix 2005
32. B. Gil, J. Datka, A. Kubacka, J. Janas, B. Sulikowski "NO Adsorption on the Active Sites of Co- and/or In-Containing Ferrierite Catalysts for the CH₄-SCR-NO Process", 3rd FEZA Conf., Prague 2005

33. B. Gil, A. Micek-Ilnicka "Sorpcja amoniaku na heteropolikwasach typu Keggina i Dawsopna", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
34. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Relative Stability of V₂O₅ Surfaces: (100), (010), (001)", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
35. A. Gomulczak, K. Wieczorek-Ciurowa, K. Gamrat, J. Stoch "Characteristics of Mechanically Activated Mixtures of V₂O₅ with Cr₂O₃", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
36. A. Govindasamy, C. Lv, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, E. Brocławik, A. Miyamoto "A Theoretical Study on the Excited State of Lanthanide Compounds", 95th Meeting of Catalysis Society of Japan, Tokyo 2005
37. A. Govindasamy, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, E. Brocławik, A. Miyamoto "Excited State Study on Rare Earth Compounds using Density Functional Method", Japanese Computer Chemical Meeting, Tokyo 2005
38. K. Góra-Marek, A. Klisińska, B. Grzybowska, J. Datka "Badania IR centrów kwasowych katalizatorów do utleniającego odwodornienia propanu i etanu: układy VO_x/SiO₂ i VO_x/MgO", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
39. R. Gryboś, M. Witko "Influence of Alkali Metal (Li, Na, K, Rb) Dopant on the Catalytic Activity of (010)V₂O₅: Cluster DFT Studies", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
40. R. Gryboś, M. Witko "Geometric Structure of Vanadia Active Phase over (001)TiO₂ (Anatase) Support under Ambient Conditions: a Periodic DFT Study", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
41. B. Grzybowska-Świerkosz "Nano-Au/oxide Support Catalysts in Oxidation Reactions: Provenance of Active Oxygen Species", Materials. 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005
42. J. Haber, J. Janas, J. Kryściak, T. Machej, H. Sadowska "Mechanizm pełnego utleniania nitroalkanów na przykładzie nitrometanu i nitroetanu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
43. J. Haber, T. Machej, J. Janas, M. Nattich "Nitrous Oxide Decomposition over Rh Supported on γ -Alumina Catalysts", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
44. J. Haber, T. Machej, M. Nattich "Wpływ O₂ i NO na aktywność katalizatorów rodowych w reakcji rozkładu podtlenku azotu", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005

45. J. Haber, T. Machej, M. Nattich, J. Janas "Influence of Promotors on Activity and Thermal Stability of Rhodium Catalyst in Decomposition of N₂O", Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005
46. J. Haber, T. Machej, M. Nattich, J. Kryściak "Wpływ NO na aktywność katalizatora Rh/ γ -Al₂O₃ w reakcji rozkładu tlenku diazotu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
47. J. Haber, K. Pamin, J. Połtowicz "Comparison of Catalytic Activity of Metallosalen Complexes Encapsulated in Different Zeolite Structure in Oxidation of Hydrocarbons", 5th World Congr. on Oxidation Catalysis, Sapporo 2005
48. J. Haber, J. Stoch, V. A. Zazhigalov "Transition Metal Promoted VPO Catalysts in Selective Oxidation of pPropane, n-Butane and n-Pentane", 5th World Congr. on Oxidation Catalysis, Sapporo 2005
49. P. Hejduk, K. Hermann, M. Witko "Probing Active Oxygen Sites at Undrecoordinated Vanadium Oxide Surfaces by Hydrogen: ab initio DFT Cluster Studies for V₂O₅(001)", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
50. P. Hejduk, C. Kolczewski, K. Hermann "Ab-initio-Clustermodelle zur Struktur und Reaktivitat von Vanadiumoxid- und Vanadiumphosphatoberflächen", Sonderforschungsbereiches 546, Berlin 2005
51. P. Hejduk, M. Witko "Adsorpcja wodoru na niewysyczonej powierzchni V₂O₅", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
52. M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, K. Nishijimai, T. Terasaki, A. Miyamoto "Theoretical Investigation of Amino Acids Role in the Theophylline Metabolism", 95th Meeting of Catalysis Society of Japan, Tokyo 2005
53. M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, K. Nishijima, T. Terasaki, A. Miyamoto "Theoretical Investigation of Amino Acids Role in the Theophylline Metabolism", 125th Annual Meeting of Pharmaceutical Society of Japan, Tokyo 2005
54. B. Jachimska, Z. Adamczyk, A. Bratek, A. Galińska-Rakoczy "Characterization of Polelectrolyte by Dynamic Light Scattering and Viscosity Measurements", 18th Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 3rd Spring Meeting on Bioelectrochemistry, Coimbra 2005
55. E. Jarek P. Warszyński "Theoretical Model of Simultaneous Adsorption of Ionic and Nonionic Surfactants and Its Application for Alkanoic Acids", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
56. E. Jarek, P. Warszyński "Theoretical Model of Simultaneously Adsorption of Ionic and Nonionic Surfactant Mixtures at the Air/Solutions Interface", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005

57. T. Jasiński, P. Warszyński "Molecular Mechanics Simulations of Adsorption of Single Hydrocarbon Chain Surfactants at Air/water Interface", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
58. T. Jasiński, P. Warszyński, K. Lunkenheimer "New Model for Description of Adsorption of Non-ionic Surfactants at Fluid Interfaces", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
59. V. Jovanović, A. Kowal "Characterization of Silver Particles Spontaneously Deposited on Glassy Carbon", 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
60. T. Kasza, A. Stokłosa, J. Zajęcki, S. S. Kurek, P. Olszewski "Cienkie filmy TiO₂ jako fotokatalizatory do usuwania lotnych zanieczyszczeń powietrza", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
61. T. Kasza, A. Stokłosa, J. Zajęcki, P. Olszewski "Thin TiO₂ Films Deposited on Ceramic Supports as 'Self-Cleaning' Photocatalytic Systems", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
62. S. Kawagoe, H. Tsuboi, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, K. Nishijima, A. Miyamoto "Development of Hybrid Acceleration Quantum Molecular Kinetics Program for in vivo Chemical Reaction Dyna mix", Japanese Computer Chemical Meeting, Tokyo 2005
63. E. Klimiec, S. Nowak, W. Zaraska, J. Stoch "The Influence of TiO₂ on the Structure, Resistance and Electrical Stability of Bulk Resistors Operating in High Voltage (15kV) Impulse Circuit", 29th Int. Conf. of Int. Microelectronics and Packaging Soc., Koszalin-Darłówko 2005
64. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The opposite Effects of Potassium Additive on the Catalytic Performance in Oxidative Dehydrogenation of Alkanes C₂-C₄ over VO_x/Oxide Supports Catalysts", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
65. A. Klisińska, K. Samson, A. Kotarba, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz "The Different Effects of Potassium Additive on the Catalytic Performance in Oxidative Dehydrogenation of Alkanes C₂-C₄ over VO_x/Oxide Support Catalysts", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
66. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Transformation of Meso- and Macroporous Amorphous Aluminosilicates into Composite Materials Containing Nanocrystalline Y Zeolite Domains", Int. Symp. "Catalytic Processes on Advanced Micro- and Mesoporous Materials", Nessebar 2005
67. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Transformation of Meso- and Macroporous Amorphous Aluminosilicates into Composite Materials Containing Nanocrystalline Y Zeolite Domains", Séminaire Hors-Ville en Chimie 1, Villars sur Ollon 2005

68. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Recrystallization of Amorphous Aluminosilicates into Composite Meso/macroporous Systems with FAU Domains", 3rd FEZA Conf. Prague 2005
69. W. Kobyzewa, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka materiału MCM-50", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
70. M. Kolasińska, A. Trybała, P. Warszyński "Ellipsometric Thickness and Wetting Properties of Polyelectrolyte Multilayers", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
71. A. Kowal, K. Kusak "Dynamika powierzchni elektrokatalizatora niklowego badana techniką in-situ STM", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
72. A. Kowal, P. Olszewski "Badania wielkości cząstek elektrokatalizatora platynowego metodami STM, AFM i XRD", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
73. A. Kowal, D. Waszak, M. Walkowiak "Badania elektrody grafitowej z dodatkiem azotku boru metodami AFM i XRD", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
74. W. Kraus "Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN – naukometryczny obraz 50-lecia", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
75. A. Kubacka, J. Janas, E. Włoch, B. Sulikowski "[In, Co]-Ferrierite: a Highly Resistant Catalyst for the deNO_x Process under Hydrothermal Conditions", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
76. A. Kubacka, J. Janas, E. Włoch, B. Sulikowski "Wysokoodporny katalizator ferrierytowy do selektywnej katalitycznej redukcji NO w obecności pary wodnej", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
77. E. Lalik, J. Rakoczy, R. Mirek, A. J. Groszek "Efekty cieplne sorpcji wody i etanolu w materiałach mikroporowatych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
78. C. Lv, X. Wang, A. Govindasamy, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, E. Broclawik, A. Miyamoto "A Large-scale Calculation on Structural and Electronic Properties of Indium Tin Oxide", 4th Int. Symp. on Transparent Oxide Thin Films for Electronics and Optics TOEO-4, Tokyo 2005
79. K. Łątka, R. Kmieć, J. Gurgul, A. W. Pacyna, M. Rams, T. Schmidt, R. Pöttgen "Magnetic Ordering in NdRhSn", European School on Nanosciences and Nanotechnologies, Grenoble 2005
80. J. Łojewska, A. Lubańska, L. Proniewicz "Badania in-situ kinetyki degradacji papieru metodą FTIR", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005

81. T. Machej, J. Janas, H. Sadowska "Selektywna katalityczna redukcja NO etanolem", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
82. T. Machej, R. Janik, H. Sadowska "Niskotemperaturowy katalizator do utleniania lotnych związków organicznych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
83. M. Macherzyński, A. Kowal, B. Macherzyńska, J. Gołaś "Microscopic Studies of the GC/poly-NiTMHPP/Nafion Electrochemical Nitric Oxide Sensor", YUCOMAT 2005, Herzeg Novi 2005
84. L. Matachowski, D. Mucha, J. Haber, M. Mikołajczyk, L. Lityńska-Dobrzyńska, Z. Czują "New Evidence on the Structure of $K_xH_{3-x}PW_{12}O_{40}$ Salts", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
85. L. Matachowski, D. Mucha, E. Lalik, J. Stoch, J. Haber, B. Gil, Z. Olejniczak "New Observations of $Cs_{2.5}H_{0.5}PW_{12}O_{40}$ Salt Structure", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
86. L. Matachowski, K. Pamin, J. Połtowicz, E. M. Serwicka, W. Jones "Mezoporowate sita molekularne jako nośniki metaloporfiryn w reakcji katalitycznego utleniania cyklooktanu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
87. M. Menke, M. Szaleniec, P. Nowak, G. Stochel, M. Witko "Dehydrogenaza etylobenzenowa – biokatalityczne utlenianie alkiloaromatów", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
88. A. Micek-Ilnicka, A. Lubańska, J. Poźniczek, A. Bielański "Catalytic Synthesis of Ethyl-tert-butyl Ether (ETBE) on Wells-Dawson Type Solid Heteropolyacid $H_6P_2W_{18}O_{62}$ ", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
89. A. Micek-Ilnicka, J. Poźniczek, A. Lubańska, A. Bielański "Synteza eteru etylo-tert-butyloвого na heteropolikwasach typu Keggina w porównaniu z heteropolikwasami typu Dawsona", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
90. A. Michna, Z. Adamczyk, M. Zembala "Detekcja multiwarstw polimerów na powierzchniach za pomocą układów koloidalnych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
91. P. Miśkowiec, J. Łojewska, A. Lubańska, L. M. Proniewicz "Badanie rodzajów i funkcji wody w papierze za pomocą metod FTIR oraz DSC i TG", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
92. D. Nikolova, R. Kardijeva, A. Kozłowska, E. Serwicka, T. Grozeva, M. Crisan, P. Tzvetkov "The Oxide Precursor State of Molybdenum Water-gas Shift Catalysts Supported on Al_2O_3 and TiO_2 : Texture Study and Catalytic Activity", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005

93. I. Nowak, M. Misiewicz, M. Ziółek, A. Kubacka, B. Sulikowski "Kwasowo-zasadowe właściwości układów tlenkowych zawierających gal i niob", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
94. A. Pacuła, T. Biswick, W. Jones, E. M. Serwicka "Otrzymywanie warstwowych materiałów typu hydroksysoli zawierających jony metali przejściowych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
95. A. Pacuła, R. Dula, K. Pamin, E. M. Serwicka "Badanie metodą EPR właściwości redoksowych heteropolikwasów osadzonych na nośniku montmorillonitowym", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
96. A. Pacuła, K. Pamin, R. Dula, A. Kozłowska, E. M. Serwicka "Synteza i właściwości fizykochemiczne $H_3PMo_{12}O_{40}$ osadzonego w matrycy montmorillonitu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
97. A. Pacuła, K. Pamin A. Kozłowska, R. Dula, E. M. Serwicka "Influence of the Preparation Method on the Catalytic Performance of Heteropolyacid/montmorillonite Catalysts", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
98. A. Pacuła, K. Pamin A. Kozłowska, J. Komorek, E. M. Serwicka "Preparation and Characterization of 12-Tungstophosphoric Acid Supported on Montmorillonite", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
99. A. Pacuła, K. Pamin, J. Kryściak-Czerwenka, E. Lalik, Z. Czula, E. M. Serwicka "Wpływ preparatyki na właściwości fizykochemiczne heteropolikwasu osadzonego w matrycy montmorillonitu", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
100. K. Pamin, J. Haber "Aktywność katalityczna heteropolikwasów o strukturze Keggina w reakcji odwadniania izopropanolu w zależności od rodzaju heteropolokwasu oraz typu nośnika", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
101. K. Pamin, J. Połtowicz, D. Mucha, J. Haber "Sole kobaltowe heteropolikwasów o strukturze Keggina jako katalizatory utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
102. K. Pamin, J. Połtowicz, E. Tabor, J. Haber "Cycloalkanes Oxidation with Molecular Oxygen Catalyzed by Encapsulated Metallosalen Complexes", Séminaire Hors-Ville en Chimie 1, Villars sur Ollon 2005
103. T. Pańczyk "Kinetics of Nitrogen Dissociative Adsorption on the Ru(0001). An Analysis Based on the Statistical Rate Theory", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
104. G. Para, P. Warszyński, E. Jarek "Hofmeister Series Effect in Adsorption of Cationic Surfactants in the Presence of 1-1 Electrolytes", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005

105. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Gąsior, K. Samson "Mixed Au Nanoparticles – Transition Metal Oxide Catalysts in Oxidation of CO and C₃ Hydrocarbons", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
106. Q. Pei, S. Kawagoe, K. Okushi, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, E. Broclawik, K. Nishijima, T. Terasaki, A. Miyamoto "Computational Chemistry Study on the ATP-Binding Cassette Transporter System", 125th Annual Meeting of Pharmaceutical Society of Japan, Tokyo 2005
107. Q. Pei, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, K. Nishijima, T. Terasaki, A. Miyamoto "Computational Chemistry Study on the ATP Binding Cassette Transporter HisP and Cell Membrane", NanoScience Conf., 2005
108. W. Piasecki "Simultaneous Analysis of Different Experimental Data Measured for Metal Oxide/electrolyte Solution Interface Based on 1-pK Basic Stern Model", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005
109. J. Poltowicz, K. Pamin, J. Haber "Synteza i badanie właściwości fizykochemicznych fluorowanych i perfluorowanych kompleksów metaloporfirynowych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
110. J. Poltowicz, K. Pamin, J. Haber "Fluorous Biphasic Catalysis-Macrocyclic Complexes with Fluorous Ponytails as Catalysts in Epoxidation of Alkenes", Séminaire Hors-Ville en Chimie 1, Villars sur Ollon 2005
111. J. Poltowicz, E. Tabor, K. Pamin, J. Haber "Metalloporphyrins and Their μ -Oxo Complexes in Oxidation of Cycloalkanes with Molecular Oxygen", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
112. R. Rachwalik, S. R. G. Carrazan, B. Sulikowski, P. Ruiz "N₂O as a Gaseous Promoter During Oxidative Dehydrogenation of Propane Over Nickel Molybdate Supported on the [Si,V]-MCM-41 Molecular Sieve", 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005
113. R. Rachwalik, A. Kubacka, Z. Olejniczak, U. Filek, B. Sulikowski "Disproportionation of Toluene on HPW/Porous Materials", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
114. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, J. Jiao, M. Hunger, B. Sulikowski "Shape-selective Isomerization of 1,2,4-Trimethyl-benzene on Ferrierite-based Catalysts", 38. Ogólnopolskie Seminarium na Temat Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Kraków 2005
115. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Transformations of m-Xylene over Dealuminated Ferrierite", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005

116. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Wpływ procesu dealuminiowania heksafluorokrzemianem amonu na właściwości fizykochemiczne i katalityczne ferierytu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
117. S. A. Rajjak, M. Ismael, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, C. A. Del Carpio, E. Broclawik, K. Nishijima, T. Terasaki, A. Miyamoto "Interaction of Antimigraine Agents With Cytochrome P450 3A4: Modelling Biotransformation Reactions by Combined QM/MM Methods", 125th Annual Meeting of Pharmaceutical Society of Japan, Tokyo 2005
118. J. Rakoczy, R. Rachwalik, J. Nowakiewicz, B. Sulikowski "Catalytic Performance of Ferrieyte Studied in Transformations of Alkylaromatic Hydrocarbons: A Comparison with Y and ZSM-5 Type Zeolite", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
119. E. Rogalska, M. Badis, W. Barzyk "Penetration of Biologically Active Antimicrobial Substances to Phospholipid Monolayers Used as Model Biological Membrane", 18th Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 3rd Spring Meeting on Bioelectrochemistry, Coimbra 2005
120. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Gąsior, K. Samson "Mixed Au Nanoparticles – Transition Metal Oxide Catalysts in Oxidation of CO and C₃ Hydrocarbons", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
121. M. Ruszel, B. Grzybowska, I. Gressel, A. Klisińska "Au/Mn(II)Cr₂O₄ Spinels as Catalysts in Oxidation of CO", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
122. M. Ruszel, B. Grzybowska, K. Samson, I. Gressel, A. Klisińska, M. Gąsior "Au/FeO_x i Au/M^{II}Cr₂O₄ jako katalizatory utleniania CO i węglowodorów C₃", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
123. M. Ruszel, B. Grzybowska, K. Samson, I. Gressel, A. Klisińska "M^{II}Cr₂O₃-spinels as Supports for Au Nanoparticles in Oxidation of CO", 1st Conf. of the Coordination Action 'CONCORDE' Understanding the Dynamic and Transient Behaviour of Oxide Catalysts in Working Conditions and Relationships with Their Catalytic Performances, Louvain-la-Neuve, Belgium 2005
124. M. Ruszel, B. Grzybowska, K. Samson, I. Gressel, A. Klisińska, M. Gąsior "Au/FeO_x and Au/M^{II}Cr₂O₄ as Catalysts for Oxidation of CO and C₃ Hydrocarbons", COST D15 Final Evaluation Conf., Maribor 2005
125. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "QM/MM Free Energy Perturbation Method Applied to Predict Acid Constants and Redox Potentials in Proteins", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
126. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "Acid Constants and Redox Potentials in Proteins Predicted by High-level QM/MM Free Energy Perturbations", Conf. "Quantum Chemistry Applied: From H₃ to Biocatalysis", Stockholm, 2005

127. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "Predicting of Acid Constants and Redox Potentials in Proteins with QM/MM Free Energy Perturbation Method", Workshop on Modeling Interactions in Biomolecules II, Prague 2005
128. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "DFT Description of Oxygen Activation Process on Selected Metalloporphyrins", Workshop III: Density-Functional Theory Calculations for Modeling Materials and Bio-Molecular Properties and Functions - A Hands-On Computer Course, Los Angeles 2005
129. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Kwantowo-chemiczny opis struktury elektronowej i właściwości katalitycznych metaloporfiryn Co, Mn, Mo", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
130. J. Słoczyński, R. Grabowski, A. Kozłowska, Z. Czula "Określenie kinetyki i mechanizmu powstawanie wysokozdyspergowanej miedzi podczas redukcji tlenkowych prekursorów katalizatorów do syntezy metanolu z CO₂", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
131. R. P. Socha "XPS Study of the SiC Surface During HF Etching and Oxidation in Water", European School on Nanoscience and Nanotechnology ESONN'05, Grenoble 2005
132. N. Spiridis, J. Barbasz, J. Korecki "Gold Adsorption on Fe₃O₄(001)", Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005
133. S. Stankov, M. Sladeczek, T. Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis, B. Sepioł, G. Vogl, A. Chumakov, R. Rüffer "UHV Surface Science at the Nuclear Resonance Beamline at the ESRF", Int. Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME 2005, Montpellier, 2005
134. J. Stoch, J. Podobiński, A. Stoch, A. Brożek "Katalityczna destrukcja struktury węgla", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
135. B. Sulikowski, E. Włoch, Z. Żurek, A. Gil, M. Lekka, B. Żmudzińska-Żurek "Crystallization of Zeolite Coatings on Pre-oxidized Steel Substrates", Int. Conf. on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2005, Phoenix 2005
136. M. Szaleniec, M. Menke, P. Nowak, J. Heider, M. Witko "Ethylbenzene Dehydrogenase - an Enzyme of Potential use for Biotransformation of Hydrocarbons", Gordon Conf. Molybdenum and Tungsten Enzymes 2005, Oxford 2005
137. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Deposition of Colloid Particles on Metal Plates", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
138. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, E. Sambe, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Kinetics of Deposition of Model Micro-capsules on Surgical Steel with Surface Modified by Biocompatible Polyelectrolytes", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005

139. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński, Z. Adamczyk "Deposition of Nano- and Microcapsules on Metals Using Anoblisque Impinging Jet Cell", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
140. M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis, W. Karaś, K. Freindl, J. Korecki "Growth of Iron on Stepped W(110)", 23rd European Conf. on Surface Science, Berlin 2005
141. M. Ślęzak, T. Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis, W. Karaś, K. Freindl, J. Korecki, "Growth and Magnetism of Fe on Flat and Stepped W(110)", Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005
142. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, Z. Sojka, A. Adamski "Badanie właściwości katalitycznych salenowych kompleksów metali przejściowych i ich organiczno-nieorganicznych hybryd", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
143. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Porfiryny kobaltu jako katalizatory utleniania cyklooktanu w systemie Lyonsa", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
144. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Influence of Zeolite Structure on Catalytic Activity of Encapsulated Metallosalen Complexes in Aerobic Oxidation", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
145. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Cobalt Porphyrins as Catalysts for Oxidation of Cyclooctane in Lyons System", Materials. 2nd Int. School - Conference on Catalysis for Young Scientists, Novosibirsk-Autai, 2005
146. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber "Influence of the Structure of Iron Porphyrins on Catalytic Activity in Oxidation of Hydrocarbons", 5th Int. School on Molecular Catalysis, Organic and Polymer Synthesis and Catalysis, Poznań-Rosnówko 2005
147. T. Taha, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, E. Broclawik, A. Miyamoto "Theoretical Studies on the Selective Oxidation and Amoxidation of Alkenes on Bismuth Molybdate Catalyst", Japanese Computer Chemical Meeting, Tokyo 2005
148. T. Taha, H. Tsuboi, M. Koyama, M. Kubo, T. Yamasaki, E. Broclawik, A. Miyamoto "A Theoretical Study on the Excited State of Lanthanide Compounds", 95th Meeting of Catalysis Society of Japan, Tokyo 2005
149. F. Tanczikó, L. Bottyán, B. Croonenborghs, L. Deák, J. Korecki, D. G. Merkel, D. L. Nagy, R. Ruffer, H. D. Rüter, E. Szilágyi, K. Szymański, A. Tunyogi, V. Vanhoof "Energy- and Time-domain Mössbauer Magnetometry of Thin Films Using Polarized Sources", Int. Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME 2005, Montpellier, 2005

150. K. Terpiłowski, M. Krasowska, J. Zawała, E. Chibowski, K. Małysa "Effect of Modifications of Roughness of the Teflon Surface on Contact Angle Values and the Bubble Attachment", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
151. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Quantum Chemical Description of Oxygen Activation Process on Selected Metalloporphyrins", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
152. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "Porównanie procesu aktywacji tlenu na porfirynach molibdenowych, kobaltowych i manganowych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
153. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Quantum Chemical Description of Surface Active Centres on Vanadium-based Catalysts", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
154. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Porównanie struktury elektronowej i geometrycznej MoO_3 , CoMoO_4 i MnMoO_4 ", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
155. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Kwantowo-chemiczne badania struktury elektronowej powierzchni mieszanych tlenków metali przejściowych na bazie tlenków wanadu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
156. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Wpływ nośnika i dodatków na właściwości katalizatorów molibdenowych. Obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
157. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Effect of Support and Additives on Properties of Molybdena-Based Catalysts", Deutsche Physikalische Gesellschaft, Berlin 2005
158. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Oxygen Species on Molybdenum-based Catalysts – Cluster DFT Studies", ISHHC 12th Int. Symp. on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, Firenze 2005
159. A. Tripkovic, S. Gojkovic, K. Popovic, J. Lovic, D. Tripkovic, A. Kowal "Kinetic Study of Formic Acid Oxidation at Carbon-supported Platinum Electrocatalyst", 56th Annual Meeting of the Int. Soc. of Electrochem., Busan 2005
160. A. Tripković, K. Popović, J. Lović, V. Jovanović, A. Kowal "Badania elektrokatalitycznego utleniania etanolu na poli- i monokrystalicznych elektrodach platynowych", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
161. D. Tripković, S. Terzić, V. Jovanović, A. Kowal "Characterization of Platinum Nanoparticles Electrochemically Deposited on Glassy Carbon", YUCOMAT 2005, Herzeg Novi 2005

162. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, El Hadji Sambe, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Kinetics of Deposition of Model Micro-capsules on Surgical Steel with Surface Modified by Biocompatible Polyelectrolytes", 19th Conf. European Colloid and Interface Soc., Geilo 2005
163. W. Turek, J. Haber, A. Krowiak "Determination of the Type of Active Centres on the Catalyst Surface Based on Kinetic Measurements Using a Test Reaction", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
164. P. Warszyński, P. Dyshlovenko "Numerical Study of Electrostatic Colloidal Interaction at Interface", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
165. P. Weroński, Z. Adamczyk, K. Jaszczółt "Modeling of Irreversible Adsorption of Particles on Random-Site Surfaces", Meeting of the External Review Committee, Center for Nonlinear Studies at Los Alamos National Laboratory, Los Alamos 2005
166. A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka membran samonośnych na bazie zeolitów MFI", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
167. M. Witko, R. Gryboś "Influence on Alkali Dopants on V₂O₅. DFT Cluster Model Studies", Deutsche Physikalische Gesellschaft, Berlin 2005
168. M. Witko, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel "Computational Studies on Nitric Oxide Interactions with Heme and Cobalamins" 7th Congr. of the World Association of Theoretically Oriented Chemists, Cape Town, 2005
169. E. Włoch, M. Lekka, B. Żmudzińska-Żurek, Z. Żurek, B. Sulikowski "Czy adhezja kryształów do podłoża decyduje o wielkości pokrycia warstw ferrierytowych na podłożach metalowych syntezowanych metodą in-situ?", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
170. W. Włodarczyk, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, A. Michalik, E. M. Serwicka "Pd and/or Cr-Doped Zr-Pillared Montmorillonite Catalysts for Complete Combustion of Chlorinated Hydrocarbons", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
171. W. Włodarczyk, A. Gaweł, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka, K. Bahranowski "Katalizatory montmorillonitowe do oczyszczania powietrza z lotnych chlorowcopochodnych organicznych (CVOC)", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
172. Yu. P. Zaitsev, V. M. Lukyanchuk, D. V. Brazhnyk, V. A. Zazhigalov, A. Kowal, M. Mikołajczyk "Catalytic Properties of Co/carbon Catalysts in CO Oxidation in Hydrogen-rich Mixtures", 4th Int. Conf. on Environmental Catalysis, Heidelberg 2005
173. M. Zając, K. Freindl, N. Spiridis, M. Ślęzak, W. Karaś, T. Ślęzak, J. Korecki "Suppression of Superparamagnetism in Ultrathin Epitaxial Magnetite Films", 23rd European Conf. on Surface Science, Berlin 2005

174. M. Zając, K. Freindl, N. Spiridis, M. Ślęzak, W. Karaś, T. Ślęzak, J. Korecki "Suppression of Superparamagnetism in Ultrathin Epitaxial Magnetite Films", Joint Meeting of the German Vacuum Soc. and the Polish Vacuum Soc. 'Vacuum Based Science and Technology' & 4th Annual Meeting of the German Vacuum Soc., Kraków 2005
175. J. Zawała, M. Krasowska, H. Hristova, K. Małyśa, D. Exerova "Influence of BSA Concentration on Acceleration, Velocity and Shape Pulsations of the Rising Bubble", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005
176. J. Zawała M. Krzan, M. Krasowska, K. Małyśa "Inducement of Dynamic Adsorption Structures at Liquid/gas Interface; Acceleration and Velocity of the Detaching Bubble", Scientific Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice SURUZ, Polanica Zdrój 2005
177. J. Zawała, M. Krzan, M. Krasowska, K. Małyśa "Influence of the Molecular Structure of Surfactant on Bubble Local Velocities", 17th European Chemistry at Interfaces Conf. ECIC XVII, Loughborough 2005
178. V. Zazhigalov, J. Stoch, A. Kowal, M. Mikołajczyk, S. Kirilov, I. Romanova "Aktywność katalizatorów Cu-Ce-O w utlenianiu tlenku węgla", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
179. V. Zazhigalov, J. Stoch, A. Kowal, M. Mikołajczyk, J. Podobiński "Activity of Ce-Cu-O Catalysts in Carbon Monoxide Oxidation" Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
180. V. Zazhigalov, Y. Zaitsev, D. Brazhnyk, I. Bacherikova, J. Stoch, A. Kowal, V. Strelko "The Peculiarities of H₂S and CO Oxidation on Carbon Catalysts Containing Nanoclusters of Vanadium and Cobalt Oxides on Their Surface", Int. Conf. on Carbon, Gyeongju 2005
181. A. Zikánova, P. Hrabánek, L. Brabec, K. Kovandová, M. Kočířik, B. Bernauer, V. Krystl, M. Derewinski "Transport Related Texture Characteristics of Composite Zeolite Based Membranes", Int. Symp. "Catalytic Processes on Advanced Micro- and Mesoporous Materials", Nessebar 2005
182. M. Zimowska, M. Bazarnik, K. Bahranowski, A. Michalik, E. M. Serwicka, Z. Olejniczak "Synteza i właściwości strukturalne aluminowanych mezoporowatych sit molekularnych typu FSM", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
183. M. Zimowska, J. Camra, B. Borzęcka-Prokop, J. Wagner, J. Dziedzic, M. Najbar "Ewolucja powierzchni katalizatora 2% wag. Rh/Al₂O₃, otrzymanego metodą zol-żel, w czasie obróbki termicznej w warunkach utleniających i redukujących", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005
184. M. Zimowska, R. Dula, R. Janik, A. Michalik, T. Machej, E. M. Serwicka "Układy typu mieszanych tlenków Cu-Mn jako katalizatory w reakcji całkowitego spalania toluenu", 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2005

185. M. Zimowska, R. Dula, A. Michalik, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Cu-Mo Oxides Derived from Layered Inorganic Precursors as Catalysts for the Complete Oxidation of Toluene", 7th European Congr. on Catalysis EuropaCat-7, Sofia 2005
186. M. Zimowska, A. Michalik, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Catalytic Combustion of Toluene over Mixed Cu-Mn Oxides", Int. Symp. on Air Pollution Abatement Catalysis, Kraków 2005
187. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Cu-Mn Mixed Oxide Systems for Removal of VOCs: from Precursors to Catalysts", Int. Symp. Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities, Kraków 2005
188. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, I. Stefanowicz-Pięta, R. Janik, T. Machej, Z. Czula, E. M. Serwicka "Highly Efficient Cu-Mn Mixed Oxide Catalysts for Total Oxidation of Toluene", 48. Zjazd PTChem i SITPChem, Poznań 2005

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

1. Z. Adamczyk "Colloids as Universal Systems for Studying Adsorption", (Universite de Geneve)
2. M. Derewiński "Siting and Distribution of Al in TON and BEA Zeolites", (Laboratoire SIEN, CNRS 7142, Universite Pierre et Marie Curie, Pari VI)
3. M. Derewiński "Catalytic Cracking", (Laboratoire de Materiaux Catalytiques et Catalyse en Chimie Organique, UMR 5618 ENSCM/CNRS, Montpellier)
4. J. Haber, T. Machej, J. Kryściak, J. Janas, H. Sadowska "The Role of Support in Catalysts for Oxidation of Nitromethane", (Université Pierre et Marie Curie, Paris VI)
5. J. Korecki "Fonony w nanostrukturach" (Seminar of Solid State Physics, Technical University AGH, Kraków}
6. A. Kowal "Application of STM and AFM Techniques for the Investigation of Corrosion Processes and Materials Protection", (CENIM-CSIC, Madrid)
7. A. Kowal "Badania nanostruktur na powierzchni metali i tlenków metodą AFM, STM i XRD", (Central Laboratory of Batteries, Poznań)
8. A. Kowal "STM and AFM Observations of Metal Corrosion" (Serbian Society of Electrochemistry, Belgrade)
9. A. Kowal, N. Matić, T. Vidaković, D. Mucha, M. Kopczyk "Nickel Electrodes with Deposited Ag Clusters (Ni/[Ag]cl) Characterized by Means of AFM, STM, XRD and Electrochemical Methods" (Electrochemistry Group, Brookhaven National Laboratory)

10. M. Krasowska "Wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na ruch bańki, przebieg zderzeń z różnymi powierzchniami międzyfazowymi oraz powstanie kontaktu trójfazowego", (Institute of Fundamental Problems of Technics PAS, Warsaw)
11. K. Małyśa "Course of Collision of Bubble with Solids and Dynamics of Three Phase Contact Formation", (Technical University AGH, Krakow)
12. K. Małyśa "Dynamics of Gas Bubble Collision with Different Interfaces", (Jagiellonian University, Krakow)
13. K. Małyśa "Influence of Surface Active Substance on Bubble Motion, Course of Collisions with Various Interfaces and Formation of the Three Phase Contact", (Technical University, Gdansk)
14. P. Nowak "Pyrite Oxidation in Aqueous Environment – Can We Avoid the Formation of Sulfates?" (Geological Survey of Finland, Laboratory of Mineral Processing, Outopumpu)
15. P. Nowak, R. P. Socha "Flotation Wastes as a Potential Source of the Environment Contamination – Column Tests of the Zn-Pb Wastes", (Institute of Orogen Mechanics PAS, Kraków)
16. W. Rudziński, T. Pańczyk "Pożegnanie XX-wiecznych teorii kinetyki adsorpcji" (Lublin Branch of Polish Physical Society, Lublin)
17. E. M. Serwicka "Mesoporous Supports as a Tool for Controlling Catalytic Performance of Metalloporphyrins" (School of Chemistry, University of Nottingham)
18. E. M. Serwicka "Hydrotalcite-derived Catalysts in Environmental Catalysis" (School of Chemistry, University of Nottingham)
19. P. Weroński, Z. Adameczyk, B. Siwek, K. Jaszczółt "Monte Carlo Random Sequential Adsorption" (Center for Nonlinear Studies, Los Alamos National Laboratory)
20. P. Weroński, Y. Jiang, S. Rasmussen "Molecular Dynamics Study of a Small PNA Molecule in a Lipid-Water System", (Center for Nonlinear Studies, Los Alamos National Laboratory)
21. M. Witko "Oxygen at V₂O₅ Surface- Quantum Chemical Studies" (Institute of Catalysis, Siberian Branch RAN, Novosibirsk)
22. M. Zimowska "Research Profile of Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Research Group Clays, Mesoporous Oxides, Nanostructures" (Institute of Chemical and Engineering Sciences, Singapore)

WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. E. Broclawik "Stosowana Chemia Kwantowa", wykład w panelu "Nowe materiały" oraz "Chemia teoretyczna i metody numeryczne", Wydział Chemii UJ, 30 godzin

2. E. Broclawik "Quantum Material Science", wykład dla studiów magisterskich, Department of Applied Chemistry, Tohoku University, Sendai, 30 godzin
3. M. Derewiński "Wstęp do spektroskopii w podczerwieni i Ramana", wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, 4 godziny
4. A. Drelinkiewicz "Chemia Nieorganiczna", wykłady i seminarium dla studentów II roku, Wydział Chemii UJ, 90 godzin
5. B. Grzybowska-Świerkosz "Podstawy katalizy heterogenicznej", wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, 25 godzin
6. J. Gurgul "Electron Spectroscopy for Chemical Analysis", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, 2 godziny
7. B. Jachimska "Metoda Dynamicznego Rozpraszania Światła (DLS) pomiary wielkości cząstek koloidalnych", wykład w ramach przedmiotu specjalistycznego Metody Analizy Instrumentalnej dla IV roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH, 2 godziny
8. B. Jachimska "Laser Doppler Velocimetry - pomiary ruchliwości elektroforetycznej cząstek koloidalnych" wykład w ramach przedmiotu specjalistycznego Metody Analizy Instrumentalnej dla IV roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH, 2 godziny
9. J. Korecki, pensum dydaktyczne AGH
10. J. Korecki, wykłady na studium doktoranckim IKiFP
11. A. Kowal, seminarium i zajęcia praktyczne technik AFM i STM, Institute of Electrochemistry ICTM, University of Belgrade, 36 godzin
12. P. Nowak "Współczesne Problemy Elektrochemii", dla studentów Wydziału Chemii UJ, 15 godzin
13. P. Nowak "Chemia" i "Chemia Środowiska", dla studentów Prywatnej Wyższej Szkoły Ochrony Środowiska w Radomiu (Filia w Miechowie), 5 godzin x 8 tygodni = 40 godzin
14. E. M. Serwicka "Elektronowy rezonans paramagnetyczny", wykład i ćwiczenia dla studentów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, 6 godzin
15. B. Sulikowski "Chemia ciała stałego: Zarys fizykochemii glinokrzemianów i zeolitów", wykłady i egzamin dla studentów IV roku Wydziału Inżynierii i Technologii Chemicznej PK, 10 godzin
16. B. Sulikowski "Kurs chemii fizycznej", wykłady dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, 44 godziny

17. M. Witko - seminaria dla doktorantów Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN, 1 godzina tygodniowo x 32 tygodnie = 32 godziny

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. S. Bem (Nitrogen Works S.A., Tarnów) "Kierunki działalności rozwojowej w Zakładach Azotowych w Tarnowie-Mościcach S.A."
2. V. Cores Corberan (Institute of Catalysis and Petrochemistry CSIC, Madrid) "Bimodal Mesoporous Catalysts for Selective Oxidation of Isobutane" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
3. U. Domańska-Żelazna (Faculty of Chemistry, Warsaw University) "Ciecze jonowe – nadzieja nowych technologii"
4. M. Ekiel-Jeżowska (Institute of Fundamental Problems of Technics PAS, Warsaw) "Oddziaływania hydrodynamiczne a współczynniki transportu zawiesin"
5. J.-B. d'Espinose de Lacaillerie (Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles) "Surface Modifications of Alumina During the Preparation of Molybdenum Based Catalysts: a Local Approach by Solid-state NMR"
6. J. Heider (Institut für Microbiologie und Genetic, Darmstadt) "New Biochemical Principles from Anaerobic Metabolism of Ethylbenzene and Toluene" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
7. J. Hennel (Institute of Nuclear Physics PAS, Kraków) "Teoria falek i jej zastosowanie do redukcji szumów i kompresji danych"
8. M. Hunger (University of Stuttgart) "Basic Principles and Applications of Solid-state NMR. Part I" [lecture of EU Project ToK-Cata]
9. M. Hunger (University of Stuttgart) "Basic Principles and Applications of Solid-state NMR. Part II" [lecture of EU Project ToK-Cata]
10. M. Hunger (University of Stuttgart) "In situ Spectroscopy in Heterogeneous Catalysis"
11. G. Koper (Delft University of Technology) "Slip and Friction in Liquid Flow over Solid Surfaces" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
12. R. Krastev (Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Potsdam) "X-Ray and Neutron Reflectometry in Studies of Interfaces" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
13. H. Lyklema (University of Agriculture, Wageningen) "Colloid Interaction Beyond DLVO: Gouy-Stern Layers, Regulation and Hetero-Interactions" [lecture of CatColl Centre of Excellence]

14. H. Lyklema (University of Agriculture, Wageningen) "On the Interpretation of Electrokinetic Potentials" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
15. J. A. Mielczarski (Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy) "Composition and Structure of Surface Layers in Naniscale"
16. E. Mileva (Institute of Physical Chemistry BAS, Sofia) "Amphiphilic Nanostructures in Fluid Media" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
17. J. Nalaskowski (University of Utah, Salt Lake City) "Application of Atomic Force Microscopy in Fundamental Studies of Flotation Separation Systems"
18. R. Olindo (Technische Universität, Munich) "Butane Isomerization on Sulfated Zirconia: Reaction Mechanism and Key Component for Active Sites" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
19. M. W. Radny (University of Newcastle, Australia) "Atomowe domieszkowanie powierzchni Si(001) – praktyka STM i Symulacja DFT" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
20. M. Rogalski (University of Metz) "Thermodynamic Properties of Nanoparticles Containing System" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
21. M. Stadler (Veeco Instruments, Germany) "New Developments in SPM" [lecture of CatColl Centre of Excellence]
22. D. Stepiński (Polish Society of Arterial Hypertension) "Profilaktyka nadciśnienia tętniczego i chorób układu krążenia"
23. A. Witko (Papal Theological Academy, Kraków) "Boże Narodzenie w sztuce" [Christmas lecture]

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. A. Drelinkiewicz "Układy Pd-polimery, właściwości fizykochemiczne i katalityczne"
2. R. Dula, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka, J. Stoch "New Mn-Containing Catalytic Materials for the Total Combustion of Toluene"
3. L. Góra "Zeolite Membranes in Catalytic Applications" [lecture of EU Project ToK-Cata]
4. W. Łasocha "Nowe metody dyfraktometrii proszkowej – metoda czy konieczność?"
5. G. Para "Adsorpcja jonowych związków powierzchniowo aktywnych na swobodnej powierzchni roztworu w obecności elektrolitów"
6. R. Tokarz-Sobieraj "DFT Description of Molybdenum Based Catalysts" [lecture of CatColl Centre of Excellence]

7. P. Weroński "Modelowanie nieodwracalnej adsorpcji koloidów z zastosowaniem techniki MCRSA"
8. P. Warszyński "Life after CatColl" [lecture of CatColl Centre of Excellence]

WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU

1. Z. Adamczyk "Małe jest piękne, czyli co mogą koloidy"
2. A. Bielański "Wodór - przyjazne dla środowiska paliwo przyszłości"
3. J. Haber "Chemia – przekleństwo czy błogosławieństwo ludzkości?"
4. J. Korecki "Czy można zobaczyć atomy?"
5. D. Rutkowska-Żbik "O Albercie Einsteinie, czyli jak jeden naukowiec, w jeden rok zrewolucjonizował wiedzę o świecie"
6. M. Szaleniec "1000 sposobów na nieśmiertelność"

WYKŁADY POPULARNO-NAUKOWE

1. J. Korecki "Promieniowanie synchrotronowe", obóz dla dzieci szczególnie uzdolnionych, Warszawa-Świder 2005
2. R. Kozłowski "Cement romański – tajemnice krakowskich kamienic", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
3. E. Serwicka "Goethe – poeta czy naukowiec?", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
4. M. Szaleniec "Alchemia - wiedza tajemna, magia, czy nauka?", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
5. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Język Alchemii", Krakon 2005, Kraków 2005
6. P. Warszyński "Nano- i mikrocząstki w naszym otoczeniu", Otwarty Uniwersytet Techniczny AGH
7. M. Zembala "Koloidy, czyli fascynujący świat małych cząstek", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005

NADANE STOPNIE I TYTUŁY NAUKOWE

DOKTORA

1. R. Gryboś "Influence of Dopants and Support on Catalytic Properties of Vanadium Pentoxide. Quantum Chemical Modelling"
2. A. Klisińska "Effect of Additives to VO_x/Oxide Support Catalysts on Their Physicochemical and Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Lower Alkanes"
3. R. Rachwalik "Transformacje węglowodorów alkiloaromatycznych na modyfikowanych katalizatorach zeolitowych"
4. D. Rutkowska-Żbik "Ligand-Binding Properties of Selected Transition Metal Tetrapyrrolic Complexes. Implications for Catalysis and Bioinorganic Chemistry"

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. ACENET ERA-NET Meeting, Kraków, 16-17 lutego 2005 (E. M. Serwicka)
2. 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 15-18 marca 2005 (B. Sulikowski)
3. Warsztaty "Ogrzewanie budowli zabytkowych", Muzeum Narodowe, Warszawa, 13-14 kwietnia 2005 (R. Kozłowski)
4. KSV Instruments Ltd, CATCOLL and SURUZ Workshop "Technologies for Characterization of Liquid and Solid Interfaces", Kraków, 18-19 maja 2005 (P. Warszyński)
5. International Symposium "Particles and Polyelectrolytes at Interfaces", 22-25 maja 2005 (P. Warszyński)
6. SURUZ Network Meeting, Kraków, 15 lipca 2005 (K. Małysa)
7. DYNASYNC Mid-Term Assessment, Grenoble, 20-24 września 2005 (J. Korecki)
8. ACENET ERA-NET Meeting, Kraków, 26 października 2005 (E. M. Serwicka)
9. DYNASYNC Scientific Meeting, Kraków, 8-9 listopada 2005 (J. Korecki)
10. "The Last CATCOLL Meeting" and SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków, 14-15 listopada 2005 (P. Warszyński, K. Małysa)
11. International Symposium "Catalysis on Oxide-type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities", Kraków, 17-19 listopada 2005 (B. Grzybowska-Świerkosz, M. Witko)

RAPORT MIĘDZYNARODOWEJ KOMISJI DORADCZEJ

REPORT of the INTERNATIONAL ADVISORY BOARD
RESEARCH ACTIVITIES of 2005
Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS

Catalysis and Surface Chemistry constitute a field at the interface of chemistry, physics, biology, engineering and material sciences that enables chemical processes to be realized with cost-, energy- and eco-efficiency. More than 80% of the processes in the chemical industry (including pharmaceuticals), worth approximately 1500 billion € depends on catalytic technologies. Catalysis gives also a key contribution to: (i) sustainable mobility, (ii) the rational use of resources, (iii) sustainable energy, (iv) quality of life and health protection, and (v) environment protection.

To address these relevant socio-economical problems it is necessary to have a critical mass of well integrated competences, which can combine the fundamental knowledge and an applied vision.

Comments on research, education and promotion of science at ICSC PAS

The Institute of Catalysis and Surface Chemistry PAS is well suited to achieve the above objective and has its points of strength in the following aspects :

- The Institute has a leading position in Poland, and its core part has worldwide visibility. It is well positioned in the European Research Area. Remarkable is the high number of research contracts with European research funding agencies.
- The Institute is a Centre of Excellence (CATCOLL) granted by EU and has a leading position in the three European networks on catalysis and surface science.
- The Institute has a fundamental approach to catalysis and surface chemistry, which is relevant for transfer of knowledge and innovation.
- The Institute explores multi-disciplinary competences ranging from surface and colloid science, material synthesis via characterization up to application. It combines theoretical and experimental approaches. It provides a forum for sharing ideas and concepts as applied to catalysis and surface chemistry.
- The number and quality of publications and conference contributions, as well as keynote and plenary lectures at international meetings, are consistent with expectations from a Centre of Excellence.
- The number of PhD students is high and the Institute achieves an excellent integration of research and education.
- The effort towards public awareness on science is outstanding. During the Open Days close to 1000 people were visiting the Institute.

Comments on funding

An important aspect for running an Institute with a strong fundamental research programme is a good balance of funds received through institutional, national and international funding bodies. The present situation appears not to be completely satisfactory. The institutional funding level is too low and limits exploratory and risky research. The possibility to dedicate part of the funds to this area will allow:

- to open new relevant lines of research such as in the field of nanostructured catalytic systems, catalysis for sustainable energy, etc.

- to stimulate young researchers,
- to install and/or improve equipment,
- to improve the innovation and the transfer of the research results to companies, to shape the future profile of the Institute.

Recommendations about future prospects for the ICSC PAS Institute

An effective integration of all the competences available in the Institute under a common vision of the research would promote synergy and further strengthen the leading position of the Institute and this would give the potential to be at the leading edge of research in Europe.

An effective collaboration with external groups, for example in the frame of thematic networks, would allow to complement present research competences with others, such as reactor engineering, etc., which will be relevant for the future.

This integrated approach would allow to explore new research area of increasing relevance not presently addressed by the Institute and which would also allow to increase the level of external funding, in addition to the requested increase in institutional funds.

The fundamental research vision of the Institute requires continuity in human resources and knowledge transfer. In this concern, it is essential to pay attention to age distribution of research staff.

For an institution at the leading edge of research, it is necessary to have access to state-of-the-art equipment, such as those used for structural studies under working conditions, kinetics of catalytic reactions as well as electron microscopy.

Gabriele Centi (*Universita di Messina, Włochy*)

Michel Che (*Universite Pierre et Marie Curie Paris VI, Francja*)

Vicente Cortes Corberan (*Instituto de Catalysis y Petroleoquimica CSIC, Hiszpania*)

Philippe Dejardin (*IEM, Universite Montpellier II, Francja*)

Dotchi Exerova (*Institute of Physical Chemistry BAS, Bułgaria*)

Hans-Joachim Freund (*Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Niemcy*)

Valentin N. Parmon (*G.K.Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Rosja*)

Blanka Wichetrlova (*J.Heyrovsky Institute of Physical Chemistry CAS, Czech Republic*)

WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ INSTYTUTU

Wypis 4

z protokołu XI posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN dnia 16 lutego 2006, dotyczący sprawozdania z działalności Instytutu w roku 2005

Przewodniczący Rady Naukowej, prof. J. Lipkowski, oddał głos prof. E. Serwickiej-Bahranowskiej, zastępcy dyrektora IkiFP PAN ds. naukowych, która przedstawiła sprawozdanie z działalności Instytutu w roku 2005. W swoim wystąpieniu prof. E. Serwicka przytoczyła dane zawarte w materiałach dołączonych do protokołu, wzbogacając je o dodatkowe informacje. Prof. E. Serwicka rozpoczęła sprawozdanie od przedstawienia bilansu Instytutu za ubiegły rok, zwracając uwagę na fakt, że wydatki Instytutu praktycznie pokrywają się z dochodami. Zwróciła również uwagę na ponad 8 % wzrost dotacji MNiI w roku 2005. Niemniej jednak, w porównaniu z 2004 rokiem Instytut zanotował nieznaczny spadek dochodów wynikający głównie z mniejszych wpływów z grantów. Ponadto Instytut otrzymał bardzo wysoką dotację na nowoczesny sprzęt do badań w ultrawysokiej próżni. Z działalnością naukową Instytutu można się zapoznać w raporcie przekazanym członkom Rady Naukowej. Prof. E. Serwicka zwróciła uwagę na dorobek naukowy Instytutu w 2005 roku, a szczególnie na pozycję Książki i Podręczniki, wymieniając kolejne wydanie, tym razem w języku angielskim podręcznika prof. A. Bielańskiego i materiały do wykładów dla międzynarodowego studium doktoranckiego przygotowane przez prof. B. Grzybowską-Świerkosz, również w języku angielskim. Ważną pozycję w dorobku Instytutu stanowią rozdziały w monografiach, opublikowane w wydawnictwach Springera i Wiley'a.

Z kolei prof. E. Serwicka przeszła do przedstawienia tematów i zadań badawczych realizowanych w ramach działalności statutowej placówki. W roku 2004 realizowano w IkiFP PAN 8 głównych tematów, które były podzielone na 34 zadania badawcze:

1. Innowacyjne katalizatory do przeróbki węglowodorów

- Utleniające odwodornienie propanu i etanu na układach CrO_x /nośnik tlenkowy z domieszkami: porównanie z reakcją izobutanu (prof. B. Grzybowska)
- Efekt domieszek różnych metali alkalicznych do katalizatorów VO_x/SiO_2 i VO_x/MgO na właściwości katalityczne w reakcji utleniającego odwodornienia propanu oraz rozkładu izopropanolu (reakcji-sondy właściwości kwasowo-zasadowych) (prof. B. Grzybowska)
- Synteza nowych typów heteropolikwasów (prof. A. Bielański)
- Wpływ struktury heteropolikwasu naniesionego na krzemionkę lub Al_2O_3 na selektywność i wydajność reakcji uwodnienia propylenu (dr. K. Pamin)
- Badanie aktywności katalitycznej ftalocyjanin kobaltu, manganu i żelaza z różnymi podstawnikami w pierścieniu kompleksu w reakcji hydroksylacji węglowodorów z różnymi donorami tlenu (dr. J. Połtowicz)
- Badanie mechanizmu adsorpcji i dysocjacji wodoru na powierzchniach katalizatorów do przeróbki węglowodorów (prof. W. Rudziński)

2. Fizykochemia metalicznych i tlenkowych monowarstw i nanoklasterów

- Kwantowo-chemiczne badania reutlenionych powierzchni tlenków metali przejściowych (prof. M. Witko)
- Wpływ koordynacji metalu centralnego na właściwości katalityczne układów V-Mg-O (dr. R. Tokarz)
- Określenie kinetyki utleniającego odwodornienia propanu w warunkach stacjonarnych na katalizatorach VO_x/CeO_2 i $\text{KVO}_x/\text{CeO}_2$ (dr. R. Grabowski)
- Przemiany utleniania-redukcji metali przejściowych wbudowanych w strukturę TiO_2 i SiO_2 otrzymanych techniką zol-żel (dr. P. Nowak)
- Badanie topografii powierzchni metali i tlenków w skali nanometrów (dr. A. Kowal)
- Wzrost i dyfuzja Fe na wycinalnej powierzchni W(110) (prof. J. Korecki)
- Oddziaływanie gazów szlachetnych z powierzchnią metali przejściowych i ich wodorków (dr. E. Lalik)

3. Struktury nanoporowate jako podstawa nowych materiałów katalitycznych

- Podstawione izomorficznie sita molekularne jako podstawa otrzymywania układów mikro/mezoporowatych (doc.M.Derewiński)
- Transformacje węglowodorów aromatycznych na katalizatorach zeolitowych (doc.B.Sulikowski)
- Krzemiany warstwowe jako podstawa mezoporowatych sit molekularnych, c.d. (prof.E.Serwicka)
- Właściwości strukturalne i elektronowe kationowych centrów aktywnych w strukturach nanoporowatych – badania kwantowo-chemiczne, c.d. (prof.E.Broclawik)
- Właściwości strukturalne i aktywność katalityczna w procesach deNO_x mezoporowatego tlenku cyrkonu modyfikowanego jonami metali przejściowych (dr.P.Olszewski)

4. Kataliza w ochronie ekosystemu

- Opracowanie stabilnego termicznie katalizatora platynowego do utleniania związków organicznych zawierających tlen, c.d. (dr.T.Machej)
- Opracowanie katalizatora do niskotemperaturowego utleniania zanieczyszczeń organicznych (dr.T.Machej)
- Utlenianie CO, etanu i propanu na układach nanocząstki złota/tlenki mieszane (prof.B.Grzybowska)
- Warstwowe związki manganu jako osnowa układów katalitycznych do całkowitego spalania związków organicznych (prof.E.Serwicka)

5. Mechanizmy procesów biokatalitycznych

- Mechanizm działania elektrod lakazowych (dr.J.Rodakiewicz)
- Strukturalne uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne, c.d. (prof.E.Broclawik)
- Metabolity ksenobiotyczne metanotrofów jako element ich metabolonu – analiza dostępnych informacji (dr.W.Kraus)

6. Dynamika układów dyspersyjnych i biokoloidalnych

- Wyznaczenie wpływu siły jonowej na kinetykę osadzania cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych (prof.Z.Adamczyk)
- Wpływ szorstkości powierzchni hydrofobowej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz-ciecz-ciała stałe (prof.K.Małyś)
- Oddziaływania związków biologicznie czynnych z modelowymi membranami fosfolipidowymi (dr.W.Barzyk)
- Adsorpcja cząstek biokoloidalnych na powierzchni włókien polimerowych, c.d. (doc.P.Warszyński)

7. Struktury samoorganizujące się i monowarstwy nanocząstek

- Wyznaczenie struktury i właściwości elektrokinetycznych multiwarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach międzyfazowych (prof.Z.Adamczyk)
- Wpływ polaryzowalności przeciwjonów na ich aktywność powierzchniową w obecności surfaktantów kationowych (doc.P.Warszyński)

8. Badania nad ochroną dziedzictwa kultury

- Określenie bezpiecznych wielkości i częstotliwości fluktuacji parametrów powietrza w otoczeniu zabytków drewnianych (doc.R.Kozłowski)

Spośród głównych tematów 5 dotyczy katalizy, 2 tematyki koloidów, a 1 ochrony środowiska. Prof. E. Serwicka stwierdziła, że taki wybór tematów odzwierciedla funkcjonowanie i wagę jaką reprezentują poszczególne części Instytutu.

Następny, ważny dział aktywności naukowej Instytutu dotyczy ministerialnych projektów badawczych własnych - grantów przyznanych przez MIiN – których w roku 2005 realizowano 16:

Projekty badawcze własne (granty) KBN

- 4 T09A 099 23 [2002-2005] Synteza eterów trzeciorzędowych na heteropolikwasach typu Dawsona jako katalizatorach – prof. A.Bielański

- 4 T09A 038 24 [2003-2005] Wpływ struktury molekularnej substancji powierzchniowo aktywnych na ich adsorpcję i samoorganizację na ciekłych granicach międzyfazowych doc. P. Warszyński
- 4 T09A 015 24 [2003-2005] Opis teoretyczny ewolucji czasowej układów adsorpcyjnych z powierzchnią energetycznie/strukturalnie heterogeniczną – prof. W. Rudziński
- 4 T08C 036 25 [2003-2006] Synteza powłok ferrierytowych na podłożach metalowych metodą in-situ i określenie ich właściwości fizykochemicznych doc. B. Sulikowski
- 4 T09A 076 25 [2003-2005] Mechanizmy tworzenia monowarstw cząsteczek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych i przewodzących – prof. Z. Adamczyk
- 3 T09B 122 26 [2004-2007] Zastosowanie fluorowego układu dwufazowego FBS (Fluorous Biphasic System) do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów prof. J. Haber
- 3 T08D 003 26 [2004-2005] Podstawy technologii otrzymywania złożonych materiałów tlenkowych do neutralizacji par toksycznych rozpuszczalników – dr A. Michalik
- 3 T09B 066 26 [2004-2007] Mezoporowate nośniki krzemionkowe jako narzędzie do sterowania procesami katalizowanymi przez makrocykliczne metalokompleksy prof. E. Serwicka-Bahranowska
- 2 P04A 042 26 [2004-2006] Struktura i aktywność enzymatyczna syntazy kwasu klawaminowego: teoretyczne badanie mechanizmu reakcji katalitycznej prof. E. Broclawik
- 3 T09A 066 27 [2004-2006] Opracowanie metodyki otrzymywania i określenie właściwości fizykochemicznych syntetycznych związków typu hydrotalkitu zawierających mangan dr R. Dula
- 3 T09A 089 27 [2004-2006] Zlokalizowana adsorpcja cząstek koloidalnych w procesach tworzenia pokryć wielowarstwowych metodą "warstwa po warstwie" – dr P. Weroński
- 3 T09A 164 27 [2004-2006] Dynamiczne struktury adsorpcyjne - wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na zmiany ruchliwości powierzchni międzyfazowej prof. K. Małyś
- 3 T08D 045 29 [2005-2007] Określenie mechanizmów fizykochemicznych tworzenia wielowarstwowych nanomateriałów ceramicznych o podwyższonej biokompatybilności dr B. Jachimska
- 3 T09A 092 29 [2005-2009] Wpływ położenia metalu przejściowego w strukturze heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną i na mechanizm reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych – dr K. Pamin
- 3 T09B 091 29 [2005-2009] Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych: metaloporfiryn, metaloftalocyjanin i metalosalenów do katalitycznego utleniania propylenu – dr J. Połtowicz
- 3 T09A 029 29 [2005-2008] membrany na bazie zeolitów typu MFI, FAU i BEA jako nowe nanomateriały dla procesów rozdziału mieszanin węglowodorów – doc. M. Derewiński

Realizację 12 z tych projektów rozpoczęto w latach poprzednich, natomiast kolejnych 4 zostało skierowanych do finansowania od roku 2005.

Bardzo ważnym aspektem działalności Instytutu są projekty badawcze promotorskie, związane głównie z istnieniem przy Instytucie Międzynarodowego Studium Doktoranckiego – od kilku lat w Instytucie prowadzi badania wielu młodych ludzi i ten obszar aktywności naukowej stanowi inwestycję w przyszłość, mającą na celu przygotowanie nowych kadr naukowych.

W roku ubiegłym w IKiFP PAN realizowano 13 promotorskich projektów badawczych:

Projekty badawcze promotorskie (granty) KBN

- 4 T08D 051 24 [2003-2005] Nowe materiały katalityczne: kompozyty minerałów warstwowych i heteropolizwiązków – prof. E. Serwicka-Bahranowska
- 4 T08A 004 25 [2003-2005] Struktura i morfologia powierzchni a adsorpcja CO na Au/Fe₃O₄(001) – prof. J. Korecki

- 4 T09B 115 25 [2003-2006] Utleniające odwodornienie izobutanu na domieszkowanych układach tlenków chromu i wanadu na nośnikach tlenkowych
prof. B.Grzybowska-Świerkosz
- 4 T09B 108 25 [2003-2006] Wpływ domieszek do układów VO_x/nośnik tlenkowy na ich właściwości fizykochemiczne i katalityczne w reakcjach utleniającego odwodornienia niższych alkanów - prof. B.Grzybowska-Świerkosz
- 3 T09A 034 26 [2004-2006] Nieodwracalna adsorpcja cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych – prof. Z.Adamczyk
- 3 T09A 038 26 [2004-2005] Adsorpcja mieszanin jonowych i niejonowych związków powierzchniowo czynnych na granicach faz ciecz/gaz – doc. P.Warszyński
- 3 T09A 085 [2004-2006] Własności powierzchniowe i elektryczne multiwarstw polielektrolitów osadzanych na makroskopowych powierzchniach – doc. P.Warszyński
- 3 T09A 092 27 [2004-2006] Wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego gaz/ciecz/ciało stałe – prof. K.Małyś
- 3 T09B 066 27 [2004-2007] Nanocząsteczki Au na nośnikach tlenkowych jako katalizatory utleniania CO i węglowodorów - prof. B.Grzybowska-Świerkosz
- 3 T09A 062 28 [2005-2007] Biokatalityczne utlenianie etylobenzenu i jego pochodnych
prof. M.Witko
- 3 T09D 010 28 [2005-2008] Mechanizm działania katalizatora rodowego do rozkładu tlenku diazotu w gazach emitowanych do środowiska – prof. J.Haber
- 3 T09A 167 29 [2005-2008] Porównanie właściwości katalitycznych metaloporfiryn i ich μ -oxo-kompleksów w procesach utleniania węglowodorów - prof. J.Haber
- 3 T09A 145 29 [2005-2008] Mechanizm oddziaływania cząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy badań adsorpcji oraz zjawisk elektrokinetycznych (promotorski) – prof. Z.Adamczyk

Dużym osiągnięciem Instytutu było zdobycie w 2005 roku projektu badawczego zamawianego. Koordynatorem tego projektu jest IKiFP. Na cały projekt badawczy przyznano 4,5 mln złotych, bierze w nim udział 13 zespołów, w tym 3 z Instytutu. Udział IKiFP wynosi 1 ml złotych. W ramach krajowych sieci badawczych realizowany jest projekt zatytułowany „Nanomateriały jako katalizatory nowych, przyjaznych dla środowiska procesów”.

Kolejnym ważnym punktem w budżecie Instytutu są finansowane przez zagraniczne instytucje projekty badawcze, stanowiące źródło poważnych kwot zasilających budżet IKiFP. Obecnie w Instytucie realizowanych jest 13 takich projektów, w tym 4 jesteśmy koordynatorami:

Projekty badawcze 5. Programu Ramowego UE

- EC 5th FP G5MA-CT-2002-04024 Centre of Excellence CATCOLL [2002-2005] Cracow Research Centre of Molecular Catalysis and Chemistry of Soft Matter (CoE-KORDYNACJA)
doc. P.Warszyński
- EC 5th FP EVK4-CT-2001-00067 FRIENDLY HEATING [2001-2005] Friendly Heating: both Comfortable for People and Compatible with Conservation of Arts Works Preserved in Churches (STREP) – doc. R.Kozłowski
- EC 5th FP EVK4-2001-0059 ROCEM [2002-2006] Roman Cement to Restore Built Heritage Effectively (STREP-KOORDYNACJA) – doc. R.Kozłowski

Projekty badawcze 6. Programu Ramowego UE

- EC 6th FP NMP4-CT-2003-001516 DYNASYNC [2004-2007] Dynamics in Nano-scale Materials Studied with Synchrotron Radiation (STREP-KOORDYNACJA)
prof. J.Korecki
- EC 6th FP MTKD-CT-2004-509832 TOK-CATA [2004-2008] Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts (ToK-KOORDYNACJA) – prof. E.Serwicka-Bahranowska
- EC 6th FP INCO-CT-2003-003355 SURUZ [2004-2007] Scientific Network "Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practise (SSA-KOORDYNACJA) - prof. K.Małyś

- EC 6th FP NMP-CT-2004-510318 POL-CAT [2004-2007] Annual Polish Conferences Are Setting Up a New Platform for Dissemination of Knowledge in the Field of Catalysis (SSA-KOORDYNACJA) – doc. B.Sulikowski
- EC 6th FP NMP4-CT-2003-001428 NANOCAPS [2004-2007] Nanocapsels for Targeted Controlled Delivery of Chemicals (STREP) – doc. P.Warszyński
- EC 6th FP SSPI-CT-3003-501837 NOAH'S ARK [2004-2008] Global Climate Change Impact on Built Heritage and Cultural Landscapes (STREP) – doc. R.Kozłowski
- EC 6th FP NMP2-CT-2004-505834 CONCORDE [2004-2007] Co-ordination of Nanostructured Catalytic Oxides Research and Development in Europe (CA) - doc. B.Sulikowski
- EC 6th FP ERAC-011784 ACENET ERA-NET [2004-2008] ERA-NET for Applied Catalysis in Europe (CA) - prof. E.Serwicka-Bahranowska
- EC 6th FP NMP2-011730-2 IDECAT [2005-2008] Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production (NoE) – prof. M.Witko

Inne projekty badawcze UE

- EC EUREKA Initiative E! CHLORCAT [2005-2006] Catalytic Cleaning of the Gases from Chlorinated Hydrocarbons – dr T. Machej

Ponadto w 2005 roku, na 30 konkurs MNIł złożono 11 propozycji własnych projektów badawczych, a 4 uzyskały finansowanie. Wyraźnie też widać, że zmieniła się polityka przyznawania grantów i coraz częściej dostają je adiunkci. W Instytucie mamy 7 takich grantów. Prof. E. Serwicka zwróciła uwagę, że w 2005 roku udzielono Instytutowi 2 patentów, w tym jednego w Rosji oraz przygotowano 1 zgłoszenie patentowe za granicą.

Wypromowano 4 doktorów:

- Robert Gryboś - Influence of Dopants and Support on Catalytic Properties of Vanadium Pentoxide. Quantum Chemical Modeling
- Anna Klisińska-Kopacz - Effect of Additives to V_{OX} /Oxide Support Catalysts on Their Physicochemical and Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Lower Alkanes
- Rafał Rachwalik - Transformacje węglowodorów alkiloaromatycznych na modyfikowanych katalizatorach zeolitowych
- Dorota Rutkowska-Żbik - Ligand-Binding Properties of Selected Transition Metal Tetrapyrrolic Complexes. Implications for Catalysis and Bioorganic Chemistry

Instytut prowadzi także ożywioną współpracę międzynarodową z 28 krajami. W ramach tej współpracy zorganizowano 24 wyjazdy badawcze, 175 wyjazdów konferencyjnych i 8 staży długoterminowych, natomiast do Instytutu przyjechało 41 osób z zagranicy. Należy podkreślić, że w stosunku do ubiegłych lat zwiększyła się liczba przyjazdów do IKiFP PAN.

Wspólne badania przyniosły wymierne efekty w postaci 20 publikacji, 10 doniesień w materiałach konferencyjnych, 54 referatów, komunikatów i posterów oraz 2 uzyskane patenty.

Instytut brał także udział w organizacji i współorganizował konferencje o randze krajowej i międzynarodowej. W roku 2005 zrealizowano 11 takich przedsięwzięć:

- ACENet ERA-NET Meeting, Kraków, 16-17 lutego 2005
- 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 15-18 marca 2005
- Warsztaty "ogrzewanie budowli zabytkowych", Muzeum Narodowe, Warszawa, 13-14 kwietnia 2005
- KSV Instruments Ltd., CATCOLL and SURUZ Workshop „Technologies for Characterization of Liquid and Solid Interfaces”, Kraków, 18-19 maja 2005
- International Symposium „Particles and Polyelectrolytes at Interfaces”, Kraków, 22-25 maja 2005
- SURUZ Network Meeting, Kraków, 15 lipca 2005
- DYNASYNC Mid-Term Assesment, Grenoble, 20-24 września 2005
- ACENET ERA-NET Meeting, Kraków, 26 października 2005
- DYNASYNC Scientific Meeting, Kraków, 8-9 listopada 2005

- „The Last CATCOLL Meeting” and SURUZ Young Scientists Workshop, Kraków, 14-15 listopada 2005
- International Symposium „Catalysis on Oxide-Type Materials. Theory and Experiment: Share Needs and Capabilities”, Kraków, 17-19 listopada 2005

Chociaż Instytut nie jest placówką dydaktyczną, lecz badawczą, działalność dydaktyczna jest również prowadzona, głównie w ramach Międzynarodowego Studium Doktoranckiego, ale nie tylko. W ramach różnych imprez, takich jak np. Festiwal Nauki w Krakowie pracownicy Instytutu byli zapraszani do przeprowadzenia wykładów lub prezentacji.

W roku 2005 zostało wygłoszonych 7 takich wykładów:

- J. Korecki "Promieniowanie synchrotronowe", obóz dla dzieci szczególnie uzdolnionych, Warszawa Świder 2005
- R. Kozłowski "Cement romański – tajemnice krakowskich kamienic", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
- E. Serwicka "Goethe – poeta czy naukowiec?", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
- M. Szaleniec "Alchemia - wiedza tajemna, magia, czy nauka?", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005
- J. Szaleniec, M. Szaleniec "Język Alchemii", Kraków 2005, Kraków 2005
- P. Warszzyński "Nano- i mikrocząstki w naszym otoczeniu", Otwarty Uniwersytet Techniczny AGH, Kraków 2005
- M. Zembala "Koloidy, czyli fascynujący świat małych cząstek", Festiwal Nauki, IKiFP PAN, Kraków 2005

Bardzo istotnym i zakończonym sukcesem przedsięwzięciem było zorganizowanie, już po raz czwarty, Dnia Otwartego – 25 października 2005. W tym dniu Instytut odwiedziło około 800 osób. W ramach imprezy zaprezentowano 6 półgodzinnych wykładów (każdy z nich wygłoszono dwukrotnie):

- „Małe jest piękne, czyli co mogą koloidy” - prof. Z. Adamczyk
- „Wodór – przyjazne dla środowiska paliwo przyszłości” - prof. A. Bielański
- „Chemia – przekleństwo czy błogosławieństwo ludzkości?” - prof. J. Haber
- „Czy można zobaczyć atomy?” - prof. J. Korecki
- „O Albercie Einsteinie, czyli jak jeden naukowiec, w jeden rok zrewolucjonizował wiedzę o świecie” - dr D. Rutkowska-Żbik
- „1000 sposobów na nieśmiertelność” - mgr M. Szaleniec

Ponadto przygotowano 19 pokazów w laboratoriach oraz wyświetlano 2 filmy z cyklu „Nauka ratuje zabytki”.

Swoje wystąpienie prof. Serwicka zakończyła krótką wzmianką o Raporcie International Advisory Board uczestniczącego w seminarium sprawozdawczym. Raport został rozdany członkom Rady Naukowej i prof. Serwicka zachęcała do zapoznania się z nim.

Na tym prof. E. Serwicka zakończyła swoje wystąpienie.

Po zakończeniu tej prezentacji prof. Lipkowski zachęcał do dyskusji, a wobec braku chętnych dodał, że on również brał udział w seminarium sprawozdawczym i był pod wrażeniem nie tylko formy ale i prezentowanych treści.

Wobec braku dalszych zgłoszeń do dyskusji prof. J. Lipkowski zaproponował przyjęcie sprawozdania z działalności IKiFP PAN w roku 2005 do akceptującej wiadomości. Przewodniczący Rady Naukowej zaproponował także przyjęcie dodatkowej uwagi wyrażającej uznanie dla Instytutu za bardzo wysoki poziom badań i przyłączającej się do opinii International Advisory Board. Wobec braku sprzeciwów przewodniczący stwierdził przyjęcie sprawozdania przez Radę Naukową do akceptującej wiadomości.