

Załącznik nr 1

do wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Autoreferat

wersja polskojęzyczna

Spis treści

1. Imię i nazwisko	3
2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe/artystyczne – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej	3
3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych/artystycznych	3
4. Wskazanie osiągnięcia	3
4a) Tytuł osiągnięcia naukowego/artystycznego	3
4b) Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego	4
4c) Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania	9
Wprowadzanie	9
Cel i zakres prac	13
Opis osiągnięcia naukowego	14
(a) Węgle aktywne	14
(b) Nanorurki węglowe	20
(c) Nanorogi węglowe	21
(d) Grafen	22
(e) Nowe modele matematyczne	23
Podsumowanie	25
Pozostałe obszary zainteresowań naukowych	26
Dalsze plany badawcze	27
Literatura	27
5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo – badawczych, dydaktycznych i organizacyjnych	29
5a) Wykaz innych prac naukowych (niewchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt 4)	29
5b) Udział w projektach badawczych	50
5c) Nagrody i wyróżnienia za działalność naukową	51
5d) Czynny udział w konferencjach naukowych	51
5e) Działalność dydaktyczna	55
5f) Opieka naukowa nad studentami w toku specjalizacji	56
5g) Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych ...	56
5h) Opiniowanie wniosków o finansowanie projektów badawczych	56
5i) Członkostwo w towarzystwach naukowych	57
5j) Udział w komitetach organizacyjnych konferencji naukowych	57
5k) Staże w zagranicznych lub krajowych ośrodkach naukowych lub akademickich	57
5l) Syntetyczne dane dotyczące dorobku naukowego	57

1. Imię i nazwisko.

Sylwester Furmaniak

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe/artystyczne – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej

1999 technik ochrony środowiska (specjalność: uzdatnianie wody, oczyszczanie ścieków),
Zespół Szkół – Rolnicze Centrum Kształcenia Ustawicznego w Złotowie

2005 magister, kierunek studiów: Chemia, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja
Kopernika w Toruniu

2010 doktor nauk chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika
w Toruniu, tytuł rozprawy: Równowagi sorpcyjne w porach materiałów węglowych –
modele analityczne i symulacje komputerowe, promotor: prof. dr hab. Artur P.
Terzyk, praca doktorska wyróżniona przez Radę Wydziału Chemii UMK

3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych/artystycznych

2005-2008

studia doktoranckie, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

2008-2013

asystent, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

2013 do chwili obecnej

adiunkt, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.)

4a) Tytuł osiągnięcia naukowego/artystycznego

Modelowanie *in silico* węgla aktywnych i nanomateriałów węglowych oraz ich właściwości
adsorpcyjnych

4b) Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

- [H1] S. Furmaniak, A.P. Terzyk,✉ P.A. Gauden, N.A. Marks, R.C. Powles, P. Kowalczyk, SIMULATING THE CHANGES IN CARBON STRUCTURE DURING THE BURN-OFF PROCESS *Journal of Colloid and Interface Science* 360 (2011) 211-219, IF₂₀₁₁ = 3.070¹

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie wszystkich modelowych struktur o różnym stopniu „wypału”; charakteryzację wszystkich WWP; wykonanie wszystkich symulacji MC; opis izoterm adsorpcji za pomocą modelu DA; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [H2] S. Furmaniak, A.P. Terzyk,✉ P.A. Gauden, P. Kowalczyk, P.J.F. Harris,✉ THE INFLUENCE OF THE CARBON SURFACE CHEMICAL COMPOSITION ON DUBININ-ASTAKHOV EQUATION PARAMETERS CALCULATED FROM SF₆ ADSORPTION DATA – GRAND CANONICAL MONTE CARLO SIMULATION *Journal of Physics: Condensed Matter* 23 (2011) 395005-1-6, IF₂₀₁₁ = 2.546

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie serii utlenionych WWP; charakteryzację wszystkich WWP; wykonanie wszystkich symulacji MC; opis izoterm adsorpcji za pomocą modelu DA; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [H3] S. Furmaniak, A.P. Terzyk,✉ P.A. Gauden, P. Kowalczyk, SIMULATION OF SF₆ ADSORPTION ON THE BUNDLES OF SINGLE WALLED CARBON NANOTUBES *Microporous and Mesoporous Materials* 154 (2012) 51-55, IF₂₀₁₂ = 3.365

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie wiązek nanorurek węglowych; wykonanie wszystkich symulacji MC; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

¹ impact factor (IF) czasopisma zgodnie z rokiem publikacji (dla prac opublikowanych w 2015 lub 2016 roku podano aktualne wartości IF opublikowane w 2015 roku, tj. IF₂₀₁₄)

- [H4] M. Wiśniewski, **S. Furmaniak**,[✉] P. Kowalczyk, K.M. Werengowska, G. Rychlicki, THERMODYNAMICS OF BENZENE ADSORPTION ON OXIDIZED CARBON NANOTUBES – EXPERIMENTAL AND SIMULATION STUDIES *Chemical Physics Letters* 538 (2012) 93-98, IF₂₀₁₂ = 2.145

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie modelowych heterogenicznych nanorurek węglowych; wykonanie wszystkich symulacji MC; wizualizację danych i wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

- [H5] **S. Furmaniak**,[✉] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, P.J.F. Harris,[✉] S. Koter, APPLICABILITY OF MOLECULAR SIMULATIONS FOR MODELLING THE ADSORPTION OF THE GREENHOUSE GAS CF₄ ON CARBONS *Journal of Physics: Condensed Matter* 25 (2013) 015004-1-9, IF₂₀₁₃ = 2.223

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; charakteryzację wszystkich WWP; wykonanie wszystkich symulacji MC; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 45 %.

- [H6] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk,[✉] K. Kaneko,[✉] P.A. Gauden, P. Kowalczyk, T. Itoh, THE FIRST ATOMISTIC MODELLING-AIDED REPRODUCTION OF MORPHOLOGICALLY DEFECTIVE SINGLE WALLED CARBON NANOHORNS *Physical Chemistry Chemical Physics* 15 (2013) 1232-1240, IF₂₀₁₃ = 4.198

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji (włącznie z generowaniem modelowych nanorogów); współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 45 %.

- [H7] **S. Furmaniak**,[✉] P. Kowalczyk, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, SYNERGETIC EFFECT OF CARBON NANOPORE SIZE AND SURFACE OXIDATION ON CO₂ CAPTURE FROM CO₂/CH₄ MIXTURES *Journal of Colloid and Interface Science* 397 (2013) 144-153, IF₂₀₁₃ = 3.552

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie serii utlenionych WWP; charakteryzację wszystkich WWP;

wykonanie wszystkich symulacji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 45 %.

- [H8] **S. Furmaniak**,[✉] NEW VIRTUAL POROUS CARBONS BASED ON CARBON EDIP POTENTIAL AND MONTE CARLO SIMULATIONS *Computational Methods in Science and Technology* 19 (2013) 47-57

- [H9] **S. Furmaniak**,[✉] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, G.S. Szymański, INFLUENCE OF ACTIVATED CARBON SURFACE OXYGEN FUNCTIONALITIES ON SO₂ PHYSISORPTION – SIMULATION AND EXPERIMENT *Chemical Physics Letters* 578 (2013) 85-91, IF₂₀₁₃ = 1.991

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie serii WWP i ich wirtualne utlenianie; wykonanie wszystkich symulacji; opis izoterm adsorpcji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [H10] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk,[✉] P. Kowalczyk, K. Kaneko,[✉] P.A. Gauden, SEPARATION OF CO₂-CH₄ MIXTURES ON DEFECTIVE SINGLE WALLED CARBON NANOHORNS – TIP DOES MATTER *Physical Chemistry Chemical Physics* 15 (2013) 16468-16476, IF₂₀₁₃ = 4.198

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie modelowych nanorogów, wykonanie wszystkich symulacji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [H11] **S. Furmaniak**,[✉] A.P. Terzyk, K. Kaneko, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, T. Ohba, SURFACE TO VOLUME RATIO OF CARBON NANOHORN – A CRUCIAL FACTOR IN CO₂/CH₄ MIXTURE SEPARATION *Chemical Physics Letters* 595-596 (2014) 67-72, IF₂₀₁₄ = 1.897

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji; przewidywanie składu fazy zaadsorbowanej

w oparciu o teorię IAS; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 45 %.

- [H12] P. Kowalczyk,  A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, M. Wiśniewski, A. Burian, L. Hawelek, K. Kaneko, A.V. Neimark, CARBON MOLECULAR SIEVES: RECONSTRUCTION OF ATOMISTIC STRUCTURAL MODELS WITH EXPERIMENTAL CONSTRAINTS *Journal of Physical Chemistry C* 118 (2014) 12996-13007, IF₂₀₁₄ = 4.772

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w charakteryzacji repliki CMS-F; wykonanie symulacji adsorpcji benzenu; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [H13] **S. Furmaniak**,  A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, P.J.F. Harris, FOLDING OF GRAPHENE SLIT LIKE PORE WALLS – A SIMPLE METHOD OF IMPROVING CO₂ SEPARATION FROM MIXTURES WITH CH₄ OR N₂ *Journal of Physics: Condensed Matter* 26 (2014) 485006-1-11, IF₂₀₁₄ = 2.346

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie wszystkich pożądanonych płaszczyzn grafenowych i komórek symulacyjnych oraz ich charakteryzację; wykonanie wszystkich symulacji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [H14] **S. Furmaniak**, M. Wiśniewski, K. Werengowska-Ciećwierz, A.P. Terzyk,  K. Hata, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, M. Szybowski, WATER AT CURVED CARBON SURFACE: MECHANISMS OF ADSORPTION REVEALED BY FIRST CALORIMETRIC STUDY *Journal of Physical Chemistry C* 119 (2015) 2703-2715, IF₂₀₁₄ = 4.772

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: zaproponowanie i opracowanie modelu dh-GDW; opis wszystkich danych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [H15] **S. Furmaniak**, S. Koter, A.P. Terzyk,  P.A. Gauden, P. Kowalczyk, G. Rychlicki, NEW INSIGHTS INTO THE IDEAL ADSORBED SOLUTION THEORY *Physical Chemistry Chemical Physics* 17 (2015) 7232-7247, IF₂₀₁₄ = 4.493

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie oraz charakteryzację wszystkich rozważanych WWP; wykonanie wszystkich symulacji; przewidywanie składu fazy zaadsorbowanej w oparciu o teorię IAS; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [H16] **S. Furmaniak**,  INFLUENCE OF ACTIVATED CARBON POROSITY AND SURFACE OXYGEN FUNCTIONALITIES' PRESENCE ON ADSORPTION OF ACETONITRILE AS A SIMPLE POLAR VOLATILE ORGANIC COMPOUND *Environmental Technology* 36 (2015) 1984-1999, IF₂₀₁₄ = 1.560

- [H17] M. Wiśniewski, **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk,  P.A. Gauden, P. Kowalczyk, PROPERTIES OF PHENOL CONFINED IN REALISTIC CARBON MICROPORE MODEL: EXPERIMENT AND SIMULATION *Journal of Physical Chemistry C* 119 (2015) 19987-19995, IF₂₀₁₄ = 4.772

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: charakteryzację rozważanej repliki filmu węglowego; wykonanie wszystkich symulacji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [H18] **S. Furmaniak**,  A.P. Terzyk, P.A. Gauden, J. Włoch, P. Kowalczyk, K. Werengowska-Ciećwierz, M. Wiśniewski, P.J.F. Harris, To what extent can mutual shifting of folded carbonaceous walls in slit-like pores affect their adsorption properties? *Journal of Physics: Condensed Matter* 28 (2016) 015002-1-19, IF₂₀₁₄ = 2.346

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie wszystkich poświadczonych płaszczyzn grafenowych i komórek symulacyjnych oraz ich charakteryzację; wykonanie wszystkich symulacji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

Powyższe prace wymieniono w porządku chronologicznym.

4c) Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

Wprowadzenie

Adsorpcja jest zjawiskiem odgrywającym ważną rolę w wielu procesach ograniczających negatywny wpływ działalności człowieka na otaczający świat [1-3]. Pozwala na redukcję ilości szkodliwych substancji emitowanych do środowiska (ich wychwyt w miejscu powstawania czy też usuwanie ze ścieków czy gazów odlotowych) lub eliminację zanieczyszczeń już obecnych w środowisku (np. uzdatnianie wody do celów komunalnych). Adsorpcja jest także składową wielu procesów przemysłowych (np. związanych z rozdziałem mieszanin czy krótkotrwałym magazynowaniem gazów). Adsorpcja reagentów jest też pierwszym etapem katalizy heterogenicznej. Ponadto pomiary adsorpcyjne są jedną z głównych technik używanych do charakteryzacji różnych materiałów porowatych, np. stosowanych jako adsorbenty. W związku z tym, badania nad procesem adsorpcji znajdują się wciąż w obszarze zainteresowań współczesnej nauki. Z jednej strony dąży się do coraz lepszego zrozumienia mechanizmu procesu oraz jego związku z różnymi czynnikami wpływającymi na jego przebieg. Z drugiej strony poszukuje się nowych adsorbentów lub sposobów modyfikacji istniejących materiałów pozwalających na zoptymalizowanie poszczególnych procesów czy też dających możliwość ich nowych zastosowań. Ważnym uzupełnieniem prac doświadczalnych w tym zakresie są badania teoretyczne. Pozwalają one na projektowanie mikrostruktury nowych adsorbentów i przewidywanie ich właściwości adsorpcyjnych, co może stać się następnie inspiracją do prób ich syntezy. Ponadto zastosowanie różnych metod symulacyjnych pozwala na bezpośredni wgląd w mechanizm procesu adsorpcji na poziomie atomowym. Dzięki temu modelowanie molekularne jest dogodnym narzędziem poszukiwania oraz wyjaśniania związków pomiędzy strukturą i/lub chemiczną naturą powierzchni adsorbentu a jego właściwościami adsorpcyjnymi.

Ważną grupę adsorbentów stanowią materiały węglowe. Najważniejszymi przedstawicielami tej grupy są węgle aktywne otrzymywane w procesie karbonizacji prekursora organicznego i jego aktywacji. Choć węgle aktywne są produkowane i stosowane na skalę przemysłową od pierwszej połowy XIX wieku [2] wciąż ma miejsce rozwój metod ich kontrolowanej syntezy i modyfikacji. Wiąże się to z rosnącymi wymaganiami stawianymi tym adsorbentom w tradycyjnych dziedzinach ich zastosowań oraz ich potencjalnymi nowymi zastosowaniami. W pewnych obszarach (jak np. wychwyt zanieczyszczeń z wody i ścieków) węgle aktywne są podstawowymi adsorbentami stosowanymi w praktyce, pomimo licznych prób zastosowania innych materiałów [1-3]. W innych procesach (np. usuwania zanieczyszczeń gazowych, rozdziału mieszanin gazów czy nośniki katalizatorów) węgle aktywne są materiałami silnie konkurencyjnymi wobec pozostałych rodzajów adsorbentów [1-3].

Koniec ubiegłego wieku przyniósł renesans zainteresowania materiałami węglowymi jako adsorbentami. Było to związane z syntezą nowych nanoform struktur węglowych (jak fullereny,

nanorurki i nanorogi węglowe, grafen i inne) [4-6]. Rozwojowi metod syntezy tego typu nanomateriałów towarzyszą liczne prace teoretyczne. W badaniach modelowych nie tylko bada się właściwości nanowęgla, ale również, jak wcześniej wspomniano, postuluje się nowe typy nanostruktur węglowych. Warto wspomnieć, że niektóre nanoformy węglowe, których istnienie przewidziano na drodze teoretycznej, zostały następnie z powodzeniem zsyntezowane [4-6].

Podczas modelowania zjawisk adsorpcyjnych z wykorzystaniem symulacji komputerowych kluczowym problemem jest sposób odwzorowania porów adsorbentu. Przeglądu najważniejszych modeli porów i/lub struktury węgla aktywnych dokonano we wcześniejszej pracy autora i wsp. [PB1]. Bardzo wiele prac bazuje na przybliżeniu nieskończonych idealnych szczelinowych porów grafitowych. Takie podejście (niezwykle popularne dzięki swej prostocie) zaniedbuje wiele aspektów wpływających na właściwości rzeczywistych adsorbentów, jak połączenia między porami, efekty związane ze skończonym rozmiarem porów, heterogeniczność powierzchni (w tym obecność grup funkcyjnych) czy możliwość obecności porów o geometrii innej niż szczelinowa (często niezdefiniowanej w sposób ścisły). Rozwiązaniem części z tych problemów jest uwzględnienie podczas symulacji skończonego rozmiaru ścian porów szczelinowych (w co najmniej jednym kierunku) lub porów o geometrii innej niż szczelinowa [PB1]. Jednakże w większości przypadków w celu realistycznego odwzorowania struktury węgla rzeczywistych konieczne jest wyjście poza model porów szczelinowych i dążenie do uwzględnienia w strukturach modelowych heterogeniczności geometrycznej, topologicznej czy chemicznej (obecności heteroatomów). Tego typu modele atomowe nanostruktury zostały określone przez Biggsa i Butsa [7] mianem wirtualnych węgla porowatych (WWP). W literaturze można odnaleźć wiele propozycji tego typu struktur. Można je podzielić na trzy grupy: (i) skonstruowane z mniejszych fragmentów węglowych odpowiednio umieszczonych w komórce symulacyjnej, (ii) uzyskanych na drodze symulacyjnej poprzez minimalizację energii oraz (iii) uzyskanych w wyniku symulacji techniką hybrydowego odwrotnego Monte Carlo (ang. hybrid reverse Monte Carlo, HRMC). Wśród przedstawicieli pierwszej grupy można wymienić np. modele zaproponowane przez Biggsa i wsp. [8,9] czy Harrisa i wsp. [10-12]. Podejście Biggsa i wsp. bazuje na hierarchicznym traktowaniu struktury węgla. Układ wzajemnie połączonych heterogenicznych porów o różnych rozmiarach powstaje pomiędzy krystalitami węglowymi. Harris i wsp., bazując na obserwacjach z wykorzystaniem wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej, zbudowali swój model węgla niegrafityzowalnego (tzw. „twardego”) z pozakrzywianych fullerenopodobnych fragmentów węglowych, w których strukturze pierścieniom 6-członowym towarzyszą również pierścienie 5- oraz 7-członowe. Obecność tego typu mikrostruktur tłumaczy wiele właściwości węgla „twardych”, a zwłaszcza ich odporność na grafityzację. Podobne podejście zastosowali ostatnio również Di Biase i Sarkisov [13]. W swojej pracy wygenerowali oni model WWP odzwierciedlający właściwości adsorpcyjne rzeczywistego węgla (Maxsorb). Podobnie jak w podejściu Harrisa i wsp. został on skonstruowany z małych fragmentów węglowych (zarówno płaskich jak i zakrzywionych). W odróżnieniu od Harrisa i wsp., Di Biase i Sarkisov dodatkowo uwzględnili możliwość obecności

grup tlenowych (hydroksylowych i karboksylowych) na brzegach fragmentów. Ponadto pozostałe brzegowe atomy węgla zostały wysycone atomami wodoru.

Główną wadą modeli podobnych do tych zaproponowanych przez Harrisa i wsp. czy Di Biase i Sarkisova jest ich niefizyczność wynikająca z zaniedbania połączeń pomiędzy poszczególnymi fragmentami. Mankamentu tego na ogół są pozbawione WWP z grupy (ii). W tym przypadku struktura jest zoptymalizowana energetycznie, co uzyskuje się stosując podczas symulacji odpowiednie pole siłowe odzwierciedlające energetykę różnych typów oraz geometrii wiązań, jakie mogą powstawać pomiędzy atomami węgla. Podczas minimalizacji energii układu powstaje zwykle jedna trójwymiarowa mikrostruktura złożona z wzajemnie połączonych fragmentów. Przykładem tego typu WWP mogą być struktury otrzymane przez Powles i wsp. [14]. W pracy tej minimalizacja energii została przeprowadzona z wykorzystaniem symulacji metodą dynamiki molekularnej (ang. molecular dynamics, MD). Warto podkreślić, iż otrzymane tą drogą WWP, podobnie jak to postulował Harris i wsp., zawierały zakrzywione fragmenty węglowe, lecz w odróżnieniu od modelu Harrisa były one wzajemnie połączone. Oczywiście metody MD nie są jedyną techniką pozwalającą na minimalizację energii nanostruktur. WWP należące do (ii) grupy były również generowane z wykorzystaniem symulacji metodami Monte Carlo (MC), np. [15].

Symulacje HRMC ((iii) grupa WWP) mogą być traktowane jako modyfikacja prostej minimalizacji energii. W tego typu metodach obok optymalizacji energetycznej struktury dąży się także do uzyskania zgodności z danymi doświadczalnymi charakteryzującymi strukturę modelowanego węgla. W tym celu często wykorzystuje się radialną funkcję rozkładu (RDF), którą można wyznaczyć w oparciu o doświadczalne pomiary rozpraszania promieni rentgenowskich. Jednocześnie ten sam parametr może być obliczony dla struktury modelowej bazując na znajomości położenia poszczególnych atomów. Optymalizacja kombinacji całkowitej energii układu oraz parametru zgodności doświadczalnej oraz teoretycznej krzywej RDF pozwala na otrzymanie stabilnej energetycznie repliki odzwierciedlającej rzeczywisty adsorbent. Symulacje metodą HRMC zostały wykorzystane do wygenerowania WWP, np. w pracach [16-18]. Tego typu struktury były następnie z powodzeniem wykorzystywane podczas modelowych badań adsorpcyjnych [18-20]. Pomimo, że symulacje HRMC pozwalają na otrzymanie mniej lub bardziej realistycznych replik materiałów rzeczywistych, to ich wykorzystanie w systematycznych badaniach modelowych jest utrudnione ze względu na brak „elastyczności”. Ponieważ odzwierciedlają one strukturę rzeczywistego węgla praktycznie niemożliwa jest modyfikacja ich właściwości, jak np. porowatość. W związku z tym, trudnym jest uzyskanie serii danych niezbędnych do określenia związku pomiędzy zmianami w porowatości węgla a jego właściwościami adsorpcyjnymi. W tego typu badaniach systematycznych o wiele bardziej użyteczne wydają się WWP z grup (i) lub (ii). Pomimo tego w wielu pracach dotyczących wykorzystania WWP do modelowania procesu adsorpcji wykorzystywana jest tylko pojedyncza struktura lub niewielka ich liczba. Prace bazujące na seriach WWP o systematycznie

zmieniających się właściwościach są natomiast nieliczne. W badaniach tego typu często nie uwzględnia się również obecności grup funkcyjnych związanych z WWP.

Również modelowanie właściwości adsorpcyjnych nanomateriałów węglowych wymaga znajomości ich struktury atomowej. Część spośród nich (jak nanorurki czy grafen) wykazuje dobrze zdefiniowaną geometrię. Dzięki temu łatwo wygenerować pojedyncze modelowe nanorurki czy płaszczyzny grafenowe. W związku z tym, w literaturze można odnaleźć liczne prace dotyczące symulacji adsorpcji wewnątrz nanorurek czy na ich zewnętrznych powierzchniach oraz na grafenie. Otwartą kwestią pozostaje natomiast sposób ich wzajemnego ułożenia w skupiskach. Bardzo często generowane są wiązki modelowych rurek o różnej geometrii. nierozwiązanym problemem pozostaje również sposób uwzględnienia heterogeniczności tych nanomateriałów węglowych podczas symulacji.

Mikrostruktura nanorogów węglowych (ang. carbon nanohorns, CNH) jest nieco bardziej skomplikowana. Przeglądu aktualnego stanu wiedzy na temat CNH (wyników badań doświadczalnych oraz teoretycznych) dokonano w rozdziale w monografii [PM11], której jestem współautorem. CNH zwykle występują w postaci kulistych agregatów. Obserwacje z wykorzystaniem mikroskopii elektronowej wskazują, że w budowie pojedynczych nanorogów można wyróżnić część o geometrii zbliżonej do cylindrycznej (część nanorurkowa) oraz stożkowe zakończenie. W literaturze można odnaleźć relatywnie niewiele doniesień dotyczących symulacji adsorpcji na CNH. Część z nich ogranicza się jedynie do badań właściwości izolowanej części stożkowej [21,22]. Niekiedy CNH są również przybliżane z uwzględnieniem jedynie części rurkowej [23-25]. Inne prace są oparte na nieco sztucznym modelu zbudowanym z nanorurki węglowej oraz nanostożka, w którym jednak zaniedbany jest sposób ich wzajemnego połączenia oraz brak jest zamknięcia drugiego końca części nanorurkowej [26,27]. Brakuje natomiast realistycznych modeli w pełni odzwierciedlających strukturę atomową pojedynczych CNH różniących się parametrami geometrycznymi. Hawelek i wsp. [28] wygenerowali z wykorzystaniem symulacji MD model agregatu zbudowanego z 24 nanorogów połączonych z kulistym rdzeniem węglowym. Uzyskany w ten sposób układ wykazywał zgodność krzywych charakteryzujących jego strukturę atomową i uporządkowanie z wynikami doświadczalnych pomiarów rozpraszania neutronów. Niestety ta struktura atomowa wydaje się być zbyt duża (zawiera około 500 000 atomów C), aby mogła być wykorzystana podczas standardowych symulacji właściwości adsorpcyjnych, w których cząsteczki adsorbentu są modelowane z uwzględnieniem ich struktury atomowej.

W pracach teoretycznych oraz podczas analizy danych doświadczalnych ważnym narzędziem pozostają wciąż modele matematyczne (równania izoterm adsorpcji). Ułatwiają one porównywanie danych dla różnych próbek, a wartości parametrów najlepszego dopasowania mogą odzwierciedlać właściwości materiału i służyć do jego prostej charakterystyki. Jednakże z uwagi na dużą liczbę teoretycznych równań izoterm adsorpcji pojawia się problem wyboru tego najlepiej odzwierciedlającego mechanizm rzeczywistego procesu. Niezwykle ważną cechą dobrego modelu poza ilościowym opisem adsorpcji jest jego weryfikacja termodynamiczna (jednoczesny poprawny

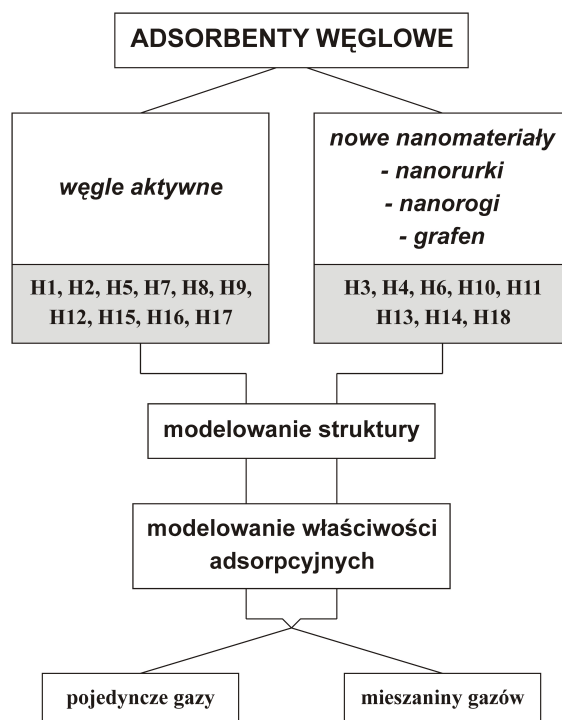
opis energetyki procesu). Wcześniejsze doświadczenia autora i wsp. [PA12] sugerują, że poprawny opis entalpii adsorpcji na rzeczywistych adsorbentach wymaga uwzględnienia heterogeniczności ich powierzchni. Jednakże liczba zaawansowanych modeli izoterm uwzględniających heterogeniczność opisanych w literaturze jest relatywnie niewielka. Część z nich została zaproponowana we wcześniejszych pracach opublikowanych przeze mnie i wsp. [PA3, PA12, PA29, PA58]. Ponadto również doniesienia literaturowe dotyczące wykorzystania równań izoterm do jednoczesnego opisu adsorpcji na nanomateriałach węglowych oraz związanej z nią entalpii są rzadkie.

Cel i zakres prac

W powyższym wprowadzeniu starałem się wskazać ograniczenia oraz niedostatki aktualnego stanu opisanych w literaturze badań dotyczących modelowania budowy węgla aktywnych oraz nowych nanomateriałów węglowych. W szczególności dotyczą one niedostatecznej ilości czy wręcz braku doniesień związanych z generowaniem oraz wykorzystaniem serii realistycznych struktur modelowych o systematycznie zmieniających się parametrach strukturalnych i/lub zawartości grup powierzchniowych. Istnienie tej luki stało się podstawową motywacją dla powstania prezentowanego cyklu prac. W związku z tym, **pierwszym celem prac było wygenerowanie autorskich serii modeli budowy węgla aktywnych oraz nanomateriałów węglowych**, w których występują systematyczne i kontrolowane różnice w strukturze porowatej i/lub chemicznej naturze ich powierzchni. Otrzymane adsorbenty modelowe zostały następnie wykorzystane podczas symulacji procesu adsorpcji. Wiązało się to z **drugim celem badań, tj. ustaleniem i/lub wyjaśnieniem związku pomiędzy parametrami strukturalnymi i/lub zawartością grup tlenowych a właściwościami adsorpcyjnymi adsorbentów węglowych** względem gazów pojedynczych oraz mieszanin dwuskładnikowych. Rysunek 1 przedstawia schemat ideowy wykonanych badań.

Osiągnięcie celów głównych było możliwe poprzez realizację następujących celów szczegółowych (niekiedy wzajemnie powiązanych):

- (1) wygenerowanie serii wirtualnych węgla porowatych o systematycznie zmieniającej się porowatości (poza modelami autorskimi uzupełniając wykorzystane również struktury bazujące na modelu Harrisa oraz replikę węglowego sita molekularnego) oraz kontrolowane wprowadzanie różnej ilości grup tlenowych na powierzchnię wybranych WWP;
- (2) modelowanie heterogeniczności nanorurek węglowych (generowanie wiązek rurek, zróżnicowanie energii adsorpcji na powierzchni rurek);
- (3) wygenerowanie serii izolowanych nanorogów węglowych różniących się parametrami geometrycznymi;
- (4) otrzymanie modeli pofałdowanych płaszczyzn grafenowych oraz konstrukcja szczelinopodobnych układów porowatych;
- (5) wykonanie symulacji MC adsorpcji wybranych gazów pojedynczych oraz mieszanin dwuskładnikowych;



Rysunek 1. Schemat ideowy wykonanych badań.

- (6) wykorzystanie wybranych istniejących modeli izoterm adsorpcji oraz (w razie potrzeby) opracowanie nowych autorskich modeli;
- (7) określenie (jakościowe i/lub ilościowe) związków pomiędzy parametrami strukturalnymi rozważanych adsorbentów węglowych i/lub zawartością na ich powierzchni heteroatomów a właściwościami adsorpcyjnymi.

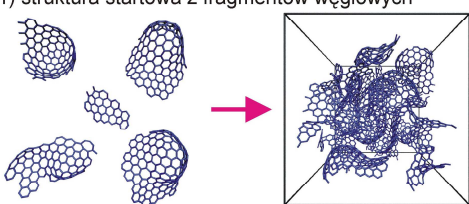
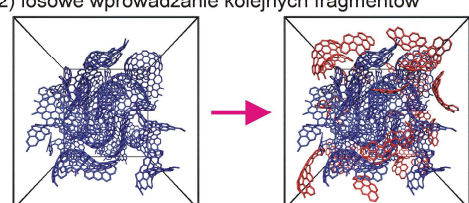
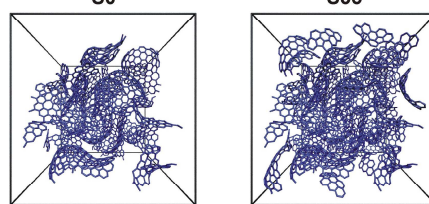
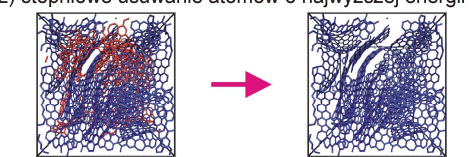
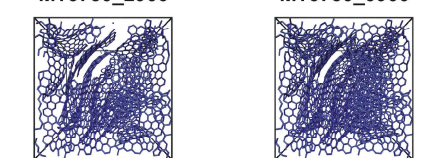
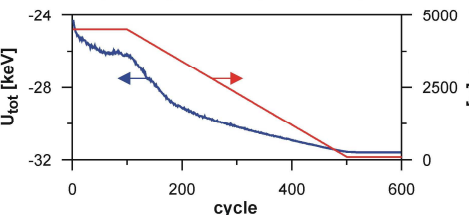
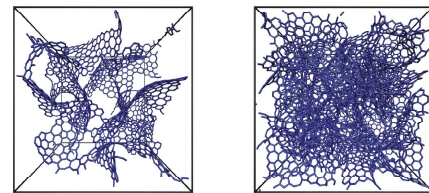
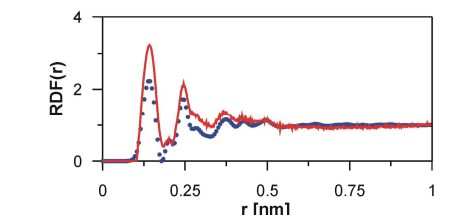
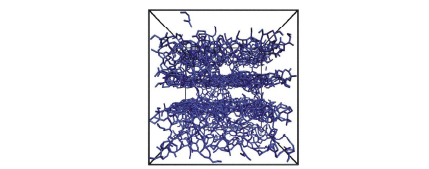
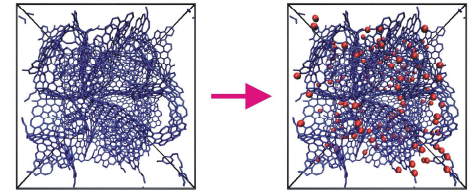
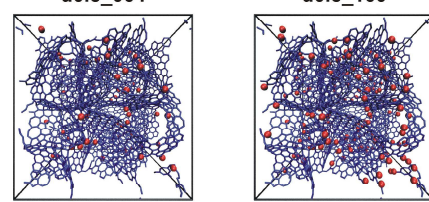
W dalszej części opisującej wyniki prac wchodzących w skład prezentowanego cyklu dokonałem ich podziału ze względu na rodzaj adsorbentu węglowego. Poszczególne grupy to: (a) węgle aktywne, (b) nanorurki i (c) nanorogi węglowe oraz (d) grafen. Finalnie przedstawiam nowe autorskie modele matematyczne izoterm adsorpcji (e).

Opis osiągnięcia naukowego

(a) Węgle aktywne

W pracach poświęconych właściwościom adsorpcyjnym węgla aktywnych [H1, H2, H5, H7-H9, H12, H15-H17] wykorzystałem modelowe struktury węglowe należące do wszystkich trzech wymienionych we wprowadzeniu grup wirtualnych węgli porowatych. Porównanie oraz charakterystykę rozważanych WWP zawarłem w tabeli 1. Rozważałem serie struktur o systematycznie zmieniającej się budowie. W części prac [H2, H5, H7] podstawą wykonanych przeze mnie symulacji była seria WWP bazująca na modelu Harrisa (grupa (i)). Jak wcześniej wspomniano, układy te są zbudowane z połączonych niezwiązanych fragmentów węglowych. Rozważana seria WWP,

Tabela 1. Porównanie oraz charakterystyka rozważanych WWP.

		Procedura generowania	Przykładowe WWP	Prace
grupa (i)	seria S	1) struktura startowa z fragmentów węglowych  2) losowe wprowadzanie kolejnych fragmentów 	S0 S35 	[H2] [H5] [H7]
	seria MT	1) generowanie struktury startowej - symulacja MD 2) stopniowe usuwanie atomów o najwyższej energii 	MT3750_2900 MT3750_3900 	[H1]
grupa (ii)	seria d	minimalizacja energii struktury - symulacja MC 	d0.5 d1.3 	[H8] [H9] [H15] [H16]
	replika CMS	symulacja HRMC - dopasowanie parametrów struktury oraz minimalizacja energii 	replika CMS 	[H12] [H17]
wirtualne utlenianie	serie S i d	stopniowe wprowadzanie grup karbonylowych 	d0.8_064 d0.8_160 	[H2] [H7] [H9] [H15] [H16]

o systematycznie zmieniającej się porowatości, została uzyskana poprzez losowe wprowadzanie niewielkich fragmentów węglowych do komórki symulacyjnej zawierającej strukturę bazową [PA9]. W dalszej części WWP bazujące na modelu Harrisa są określane jako seria S (zgodnie z notacją przyjętą w [PA9]). Modele z grupy (ii), tj. trójwymiarowe zoptymalizowane energetycznie

heterostrukury, były podstawą prac [H1, H8, H9, H15, H16]. W pracy [H1] punkt wyjścia stanowiły węgle modelowe uzyskane w wyniku symulacji MD z zastosowaniem procedury wyżarzania (stopniowego zmniejszania temperatury podczas symulacji). Wykorzystałem trzy różne struktury początkowe otrzymane dla różnych wartości temperatury startowej. Zostały one użyte do modelowania procesu „wypału” węgla aktywnego. W tym celu usuwałem kolejno atomy węgla charakteryzujące się najwyższą energią. W ten sposób uzyskałem trzy serie WWP o systematycznie zmieniającym się stopniu „wypału”, a co za tym idzie również porowatości. Serie te są dalej oznaczane jako MT [H1]. W pracy [H8] zaproponowałem natomiast autorską procedurę generowania WWP bazującą na symulacjach metodami MC. Wygenerowałem serię 9 węgli o systematycznie zmieniającej się porowatości (seria d [H8]), które zostały następnie wykorzystane w dalszych pracach modelowych [H9, H15, H16]. Różnice w strukturach poszczególnych WWP w serii d są konsekwencją różnej gęstości atomów węgla w komórce symulacyjnej. Finalnie, współuczestniczyłem również w pracach mających na celu uzyskanie repliki rzeczywistego węglowego sita molekularnego (ang. carbon molecular sieve, CMS) za pomocą symulacji HRMC (grupa (iii)) [H12]. Otrzymana w ten sposób struktura wykazywała dobrą zgodność parametrów strukturalnych (radialnej funkcji rozkładu oraz czynnika struktury) z wynikami uzyskanymi w oparciu o doświadczalne pomiary rozpraszania promieni X. Replika CMS została następnie wykorzystana podczas modelowania właściwości adsorpcyjnych tego materiału [H12, H17].

Wykorzystując WWP modelowałem nie tylko wpływ systematycznych zmian porowatości, ale badałem również związek pomiędzy obecnością grup tlenowych a właściwościami adsorpcyjnymi węgli [H2, H7, H9, H15, H16]. W tym celu wykorzystałem procedurę wirtualnego utleniania [PA20], która pozwala na kontrolowane wprowadzenie na powierzchnię materiału różnej liczby heteroatomów przy zachowaniu praktycznie niezmięnionej struktury porowatej węgla.

Powyżej opisane WWP wykorzystałem do modelowania ich właściwości adsorpcyjnych. Rozwazałem adsorpcję zarówno pojedynczych gazów (Ar, N₂, SF₆, CF₄, SO₂, C₆H₆, CH₃CN lub C₆H₅OH), jak i mieszanin dwuskładnikowych (CO₂/CH₄, CO₂/N₂, CH₄/N₂ lub H₂/CO). Niskotemperaturowa adsorpcja gazów obojętnych (Ar lub N₂) jest narzędziem szeroko stosowanym w praktyce do charakteryzacji materiałów porowatych. W związku z tym, modelowanie tego zjawiska jest prostym sposobem oceny realistyczności rozważanych WWP. Takiej weryfikacji serii autorskich struktur węglowych dokonałem w pracach [H1] oraz [H8] bazując na wysymulowanych izotermach adsorpcji Ar (serie MT oraz d; seria S została zweryfikowana pod tym względem we wcześniejszej pracy autora i wsp. [PA9]). Dane te były analizowane z wykorzystaniem standardowych metod adsorpcyjnych, jak wysokorozdzielcze krzywe α_s , krzywe rozkładu potencjału adsorpcyjnego (ang. adsorption potential distribution, APD) czy opis izoterm za pomocą równania Dubinina-Astakhova (DA). W przypadku serii MT o wzrastającym stopniu „wypału” [H1] obserwowane zmiany kształtu izoterm adsorpcji Ar oraz bazujących na nich krzywych pochodnych (α_s i APD), a także parametrów równania DA w pełni korespondują z systematycznymi zmianami porowatości węgli. Analogiczne

zachowanie jest obserwowane doświadczalnie dla węgla poddawanych procesowi „wypału” [2]. Warto podkreślenia jest również, że zależność położenia maksimum na krzywej APD związanego z zapelnianiem wąskich mikroporów od średniego rozmiaru porów dopełnia zależności opisane przez autora i wsp. we wcześniejszej pracy [PA9] oraz obserwowane doświadczalnie [29] (Rys. 6 w [H1]). Fakty te potwierdzają realistyczność prostego modelu „wypalania” węgla. W pracy [H1] podjęto ponadto próbę oceny wiarygodności standardowej metody wyznaczania funkcji rozkładu rozmiarów porów w oparciu o izotermę adsorpcji oraz bazę izoterm lokalnych w idealnych porach szczelinowych o różnej szerokości. Również seria d (wygenerowana przeze mnie poprzez minimalizację energii metodą MC) [H8] odzwierciedlała obserwowane doświadczalnie zmiany kształtu izoterm adsorpcji Ar, krzywych α_s i APD oraz parametrów modelu DA związane z systematycznymi zmianami w porowatości poszczególnych węgli. Co więcej, modelowe węgle zawierały w swojej strukturze pofałdowane fullerenopodobne fragmenty węglowe, których obecność w strukturze węgla niegrafityzowalnych sugerują wspomniane we wprowadzeniu obserwacje Harrisa i wsp. [10-12]. Jednakże uzyskane przeze mnie WWP były pozbawione głównej wady modelu Harrisa i wsp., tj. poszczególne fragmenty węglowe były wzajemnie połączone i tworzyły jedną spójną trójwymiarową strukturę.

Jak wcześniej wspomniałem, badana replika węglowego sita molekularnego [H12] uzyskana w oparciu o symulacje HRMC odzwierciedla strukturę rzeczywistego materiału. Potwierdzeniem tego faktu jest dobra zgodność izoterm adsorpcji N_2 wysymulowanej dla tego WWP z wynikami pomiarów doświadczalnych. Pewne rozbieżności są obserwowane jedynie w obszarze niskociśnieniowym, w którym przebieg izoterm doświadczalnej może być нефизyczny na skutek braku stanu pełnej równowagi w związku z problemami dyfuzyjnymi. Dodatkowym potwierdzeniem realistyczności repliki jest również jakościowa zgodność wysymulowanej oraz doświadczalnej izoterm adsorpcji benzenu. Warto również wspomnieć, że dzięki wykonaniu symulacji molekularnych możliwy był bezpośredni wgląd w mechanizm procesu adsorpcji w wąskich mikroporach badanego węgla. Wykonane obliczenia pozwoliły również na przewidzenie stanu termodynamicznego (entropii) zaadsorbowanego azotu. Obliczona entropia N_2 jest zbliżona do tej dla ciała stałego. Sugeruje to, że w układach z wąskimi mikroporami niektóre standardowe teorie bazujące na założeniu stanu ciekłego adsorbentu w porach (jak np. teoria objętościowego zapelniania porów, zasada Gurvicha, równanie Kelvina czy model BET) powinny być stosowane z ostrożnością.

Dalsze prace dotyczące wykorzystania WWP do modelowania procesu adsorpcji pojedynczych gazów [H2, H5, H9, H16, H17] są omówione chronologicznie. Następnie przedstawiono wyniki badań dotyczących modelowania adsorpcji mieszanin gazów [H7, H12, H15].

W pracy [H2] wykorzystując wybrane węgle z serii S modelowałem wpływ obecności grup tlenowych na adsorpcję SF_6 . SF_6 jest jednym z gazów cieplarnianych wykorzystywanym powszechnie między innymi w przemyśle energetycznym czy metalurgicznym. Ponadto niektórzy badacze sugerują wykorzystanie tego związku chemicznego do charakteryzacji porowatości adsorbentów. Według mojej

wiedzy była to pierwsza praca z wykorzystaniem symulacji komputerowych bazujących na realistycznym modelu węgla oraz uwzględniająca obecność grup funkcyjnych podczas modelowania adsorpcji tego gazu. Uzyskane izotermy adsorpcji analizowałem z wykorzystaniem równania DA. Wykazałem, że obecność grup polarnych istotnie zwiększa adsorpcję SF_6 (zwłaszcza w obszarze niskociśnieniowym). Zmiany te znalazły odzwierciedlenie w uzyskanych parametrach modelu DA, które były liniowo skorelowane z procentową zawartością tlenu (Rys. 4 w [H2]). Uzyskane wyniki z jednej strony wskazują sposób modyfikacji węgla stosowanych do wychwytu SF_6 . Z drugiej strony wykazano, że opis izoterm adsorpcji SF_6 za pomocą równania DA nie powinien być wykorzystywany do charakteryzacji porowatości węgla, których powierzchnia została utleniona.

W kolejnej pracy [H5] badałem wpływ systematycznych zmian porowatości na adsorpcję innego gazu cieplarnianego – CF_4 . Były to pierwsze badania symulacyjne nad adsorpcją tego gazu z wykorzystaniem realistycznych modeli struktury węgla aktywnego. Wcześniejsze doniesienia literaturowe bazowały na modelu idealnych porów szczelinowych. Zasadniczo brakuje również prac doświadczalnych oceniających w systematyczny sposób wpływ porowatości węgla na adsorpcję CF_4 . W związku z tym, wykonane symulacje bazujące na WWP serii S pozwoliły na lepsze zrozumienie związków pomiędzy parametrami charakteryzującymi strukturę porowatą węgla a ich właściwościami adsorpcyjnymi względem CF_4 . Ponieważ temperatura krytyczna CF_4 wynosi 227.51 K (zaś symulacje wykonałem dla 283, 298 oraz 313 K) uzyskane wyniki pozwoliły również na weryfikację nadkrytycznego analogu równania DA. Zastosowanie empirycznego równania Amankwaha-Schwarza (przewidującego wartość pozornego ciśnienia pary nasyconej dla warunków nadkrytycznych) dało bardzo dobry opis wysymulowanych oraz wybranych doświadczalnych izoterm adsorpcji. Udowodniono również związek pomiędzy średnim rozmiarem porów a empirycznymi parametrami modelu. Warto również podkreślić, że wyniki symulacji korespondowały z danymi doświadczalnymi.

W pracy [H9] wykorzystałem symulacje MC oraz wybrane WWP serii d do badań nad wpływem obecności grup tlenowych na fizysorpcję SO_2 . Uzyskane wyniki potwierdziły istotny pozytywny wpływ utlenienia powierzchni węgla na adsorpcję tego gazu. Dzięki bezpośredniemu wglądowi w mechanizm procesu na poziomie atomowym wykazałem, że zwiększenie adsorpcji jest konsekwencją nie tylko bezpośredniego oddziaływania cząsteczek SO_2 z grupami, ale również wynika z dalekozasięgowego charakteru oddziaływań elektrostatycznych. Dzięki temu energia adsorpcji wzrasta również w miejscach odległych od grup. Dodatkowo wykorzystanie równania izoterm CMMS pozwoliło na określenie ilościowego związku pomiędzy adsorpcją SO_2 oraz zawartością tlenu. Obserwowane korelacje były analogiczne jak te zaobserwowane we wcześniejszych badaniach doświadczalnych [PA6].

W pracy [H16] podjąłem próbę zrozumienia związku pomiędzy strukturą porowatą oraz obecnością heteroatomów a adsorpcją lotnych związków organicznych na przykładzie acetonitrylu. W sposób systematyczny wykonałem serie symulacji MC dla WWP serii d różniących się porowatością oraz zawierających różną liczbę grup karbonylowych (przy praktycznie takiej samej

porowatości). Obydwa czynniki istotnie wpływały na adsorpcję CH_3CN . Zmniejszenie średniego rozmiarów porów oraz zwiększenie zawartości tlenu wiązało się z istotną poprawą efektywności procesu (wzrost adsorpcji w zakresie niskociśnieniowym oraz redukcja ciśnienia zapełniania porów). Wykazałem, że wpływ każdego z czynników nie jest proporcjonalny. Efektywność zapełniania porów zwiększała się gwałtownie po przekroczenie pewnej wartości (poniżej określonej średnicy porów oraz powyżej pewnej zawartości tlenu). Wykazałem także, że w przypadku badań modelowych grupy karbonyłowe mogą być traktowane jako prosta reprezentacja bardziej skomplikowanych grup tlenowych. W tym celu dla oddziaływań acetonitrylu z różnymi rodzajami grup porównywałem ich energię oraz zasięg. Kombinacja tych dwóch parametrów wskazuje na podobny wpływ grup karbonylowych oraz hydroksylowych. Natomiast w przypadku grup karboksylowych ich dobrą reprezentacją mogą być dwie sąsiadujące grupy karbonyłowe.

Praca [H17] dotyczyła modelowania adsorpcji fenolu z fazy gazowej w porach repliki CMS. Wyniki wykonanych przeze mnie symulacji MC były porównywane z doświadczalną izobarą adsorpcji fenolu dla tego materiału oraz rezultatami symulacji dla idealnych porów szczelinowych. Uzyskanie zgodności przebiegów izobar wysymulowanej dla repliki oraz doświadczalnej wymagało zwiększenia wartości parametrów związanych z energetyką oddziaływań adsorbent-adsorbat (głębokości studni potencjału) w stosunku do standardowych parametrów stosowanych w pracach modelowych dla grafitu i innych materiałów węglowych. Może to wynikać z różnicy w polaryzowalności atomów węgla. Warto również podkreślić znaczące różnice w przebiegu izobar dla repliki oraz idealnych porów szczelinowych. Wynikają one z różnic właściwości zaadsorbowanego fenolu (jak stopień uporządkowania czy liczba wiązań wodorowych powstających między cząsteczkami). W związku z tym, uzyskane wyniki sugerują niską przydatność modeli porów idealnych w zrozumieniu zachowania fenolu zamkniętego w wąskich heterogenicznych porach węgla rzeczywistych. W takich przypadkach konieczna jest konstrukcja zaawansowanych modeli jak WWP rozważane przez autora i wsp.

W pierwszej pracy poświęconej modelowaniu adsorpcji mieszanin gazów w porach węgla aktywnych [H7] wykorzystałem serię S do oceny wpływu zmian porowatości oraz obecności grup tlenowych na efektywność rozdziału mieszaniny CO_2/CH_4 . Według mojej wiedzy była to pierwsza praca bazująca na symulacjach komputerowych porównująca w systematyczny sposób efekty związane z obydwoma czynnikami. Podczas gdy zmniejszenie rozmiaru porów wiązało się ze wzrostem równowagowego współczynnika rozdziału o co najwyżej kilkadziesiąt procent to utlenienie powierzchni węgla skutkowało nawet trzykrotną poprawą efektywności rozdziału. Wynika to z elektrycznej natury cząsteczki CO_2 , która posiada moment kwadрупolowy. W związku z tym, cząsteczki CO_2 oddziałują o wiele silniej z grupami polarnymi niż cząsteczki metanu (obdarzone jedynie momentem oktopolowym). Inną interesującą obserwacją (zarówno dla węgla nieutlenionych jak utlenionych) był również fakt, że obecność CH_4 jedynie w niewielkim stopniu wpływa na

adsorpcję CO_2 w porównaniu z adsorpcją czystego składnika, podczas gdy już niewielki dodatek CO_2 istotnie zmniejszał adsorpcję CH_4 .

W kolejnej pracy dotyczącej tej tematyki [H15] wykorzystując wybrane WWP z serii d modelowałem adsorpcję i rozdział mieszanin CO_2/CH_4 , CO_2/N_2 oraz CH_4/N_2 . Głównym celem badań było sprawdzenie stosowalności teorii idealnego roztworu zaadsorbowanego (ang. ideal adsorption solution theory, IAST). IAST jest często stosowana w praktyce do przewidywania adsorpcji składników w mieszaninie gazów w oparciu o dane adsorpcyjne dla czystych składników. Wykonałem systematyczne symulacje dla mieszanin o różnym składzie (ułamki molowe od 0.1 do 0.9) oraz pod różnym ciśnieniem całkowitym (0.1 – 1.0 MPa). Uzyskane wyniki potwierdzają, że IAST w zadawalający sposób przewiduje adsorpcję składnika adsorbowanego preferencyjnie (CO_2 dla mieszanin CO_2/CH_4 , CO_2/N_2 oraz CH_4 dla CH_4/N_2). Natomiast przewidywana adsorpcja drugiego składnika może być obarczona błędem sięgającym kilkudziesięciu procent zwłaszcza, gdy jego stężenie w fazie objętościowej jest niskie a ciśnienie całkowite mieszaniny jest wysokie. Dodatkowo przeprowadzono analizę termodynamiczną wysymulowanych danych (między innymi obliczano wartości współczynnika aktywności). Uzyskane wyniki wskazują, że założenie idealności fazy zaadsorbowanej w pewnych warunkach może być zbyt daleko idącym przybliżeniem, co wyjaśnia ograniczenia stosowalności IAST.

Również replika CMS została wykorzystana do modelowania adsorpcji mieszaniny gazowej. W pracy [H12] wykorzystano symulacje MC do przewidzenia efektywności rozdziału mieszaniny CO/H_2 (gazu syntezowego). Uzyskane wyniki sugerują, że dzięki obecności wąskich mikroporów badany materiał pozwala na rozdział tej mieszaniny.

(b) Nanorurki węglowe

Modelowanie właściwości adsorpcyjnych nanorurek węglowych (ang. carbon nanotube, CNT) było przedmiotem prac [H3, H4, H14]. Ponadto w pracach [H6, H10, H11, H13, H18] CNT zostały wykorzystane jako materiał odniesienia.

Celem pracy [H3] było sprawdzenie czy wiązki zbudowane z otwartych stykających się jednościennych CNT mogą być wykorzystane jako adsorbenty do wychwytu i/lub przechowywania SF_6 oraz ustalenie optymalnej geometrii takich układów. W tym celu zbudowałem odpowiednie wiązki wykorzystując CNT o różnej średnicy oraz różniące się indeksami chiralności (nanorurki typu zig-zag oraz fotelowe), które następnie wykorzystałem podczas symulacji MC. Poszczególne układy były porównywane pod względem adsorpcji SF_6 w przeliczeniu na jednostkę masy adsorbentu oraz efektywności wykorzystania objętości układu. Uzyskane wyniki wskazują, że w przypadku wychwytu SF_6 występującego w niewielkich stężeniach preferowane powinny być układy zbudowane z wąskich nanorurek. Natomiast w przypadku wysokociśnieniowego przechowywania SF_6 pomimo, że adsorpcja tego gazu w przeliczeniu na jednostkę masy rurek wzrasta wraz ze wzrostem ich średnicy, to efektywność wykorzystania objętości układu osiągnęła maksimum dla CNT o średnicach 2.7-2.8 nm.

Ponadto nie zaobserwowano wpływu chiralności CNT na ich właściwości adsorpcyjne względem SF_6 w temperaturze pokojowej.

W kolejnej pracy [H4] zbadano wpływ modyfikacji powierzchni CNT na adsorpcję benzenu oraz termodynamikę tego procesu (pomiaru kalorymetryczne). Wykorzystano wyniki pomiarów doświadczalnych dla serii CNT poddanych procesowi utleniania w roztworze kwasu azotowego (V). Dodatkowo wykonałem symulacje MC. Aby odtworzyć obserwowane doświadczalnie zmiany związane z modyfikacją powierzchni CNT na skutek ich utleniania zaproponowałem model nanorurki heterogenicznej. Takie proste podejście (polegające na zwiększeniu głębokości studni potencjału dla części atomów węgla w zewnętrznej ścianie nanorurki) pozwoliło na uzyskanie dobrej zgodności jakościowej z wynikami eksperymentalnymi. Uzyskane wyniki potwierdzają, że modyfikacja powierzchni CNT istotnie wpływa na stan termodynamiczny adsorbowanego benzenu (wraz ze wzrostem stopnia modyfikacji wzrasta stopień uporządkowania fazy zaadsorbowanej zwłaszcza w obszarze niskociśnieniowym).

Finalnie, w pracy [H14] wykorzystano model matematyczny do analizy doświadczalnych izoterm adsorpcji H_2O oraz związanej z nimi kalorymetrycznej entalpii adsorpcji dla próbek siedmiu CNT (w tym zmodyfikowanych w różnych warunkach). Autorski model izoterm adsorpcji oraz uzyskane wyniki zostaną omówione szczegółowo w punkcie (e).

(c) *Nanorogi węglowe*

Punktem wyjścia dla prac nad nanorogami węglowymi i ich właściwościami adsorpcyjnymi było zaproponowanie przeze mnie i wsp. [H6] procedury generowania realistycznych modeli atomowych pojedynczych nanorogów różniących się parametrami geometrycznymi. Zastosowana metoda bazuje na wspomnianych we wstępie obserwacjach doświadczalnych wyróżniających w budowie CNH część stożkową oraz tubularną. W pierwszym kroku generowano część stożkową, której koniec zamykał układ zawierający odpowiednią liczbę pierścieni 5-członowych (odpowiednio do kąta rozwarcia). Następnie wykorzystując symulacje MC generowano zamknięcie części rurkowej (idealnej jednościennej nanorurki węglowej) z jednej strony oraz jej połączenie z częścią stożkową z drugiej. W oparciu o autorską procedurę wygenerowałem kilka serii modelowych CNH o systematycznie zmieniających się parametrach geometrycznych: kącie rozwarcia, średnicy oraz długości [H6, H10]. Według mojej wiedzy były to pierwsze doniesienia dotyczące wygenerowania w pełni atomistycznych modeli pojedynczych CNH.

Struktury te zostały następnie wykorzystane do zbadania wpływu powyżej wymienionych czynników na mechanizm niskotemperaturowej adsorpcji Ar we wnętrzu CNH [H6]. W związku z wysoką energią oddziaływań atomów Ar w pobliżu wierzchołka części stożkowej to właśnie tam rozpoczynał się proces adsorpcji. Kolejne atomy były wiązane na powierzchni pozostałych części CNH, tworząc monowarstwę. Finalnie następowało zapełnianie całej objętości CNH. Mechanizm ten znajdował swoje odzwierciedlenie w energetyce procesu (wartościach izosterycznej entalpii

adsorpcji). Zmiany wszystkich rozważanych parametrów geometrycznych CNH wpływały na przebiegi izoterm adsorpcji. Przy czym, największe różnice były obserwowane przy zmianie średnicy części tubularnej. Zmiany kąta rozwarcia wiązały się jedynie z niewielkimi różnicami w przebiegach izoterm i entalpii adsorpcji wynikającymi z różnic w energetyce oddziaływań atomów z częścią stożkową. Zaobserwowano również, że wraz ze wzrostem długości CNH izoterma adsorpcji coraz bardziej zbliża się do tej we wnętrzu nieskończonej jednościennej nanorurki węglowej. Jednakże istotne różnice (w obszarze niskich pokryć) były obserwowane w energetyce procesu. Ujawniał się tu wpływ obecności części stożkowej. Obserwacje te wskazują, iż przy ilościowym modelowaniu adsorpcji wewnątrz CNH mogą być one przybliżane za pomocą nanorurek ze względu relatywnie dużą długość rzeczywistych CNH (kilkadziesiąt nm). Jednakże w przypadku modelowania bardziej zaawansowanych zastosowań CNH (np. jako nanokomór reakcyjnych) wszystkie elementy strukturalne powinny być uwzględniane, gdyż wysoka energia oddziaływań z częścią stożkową może istotnie wpływać na badany proces. Porównując izotermę doświadczalną z izotermami wysymulowanymi dla modelowych CNH pokazano także, że odtworzenie danych doświadczalnych wymaga uwzględnienia dystrybucji średnic nanorogów.

W dalszej kolejności modelowe CNH wykorzystałem do symulacji adsorpcji oraz rozdziału mieszaniny CO_2/CH_4 [H10, H11]. Tu również oceniałem wpływ systematycznych zmian parametrów geometrycznych na efektywność procesu. Podobnie jak w przypadku adsorpcji Ar najważniejszym czynnikiem decydującym o skuteczności rozdziału była średnica części tubularnej. W porównaniu do adsorpcji wewnątrz nieskończonych jednościennych nanorurek węglowych o analogicznej średnicy, nanorogi wykazywały większe wartości równowagowego współczynnika rozdziału (i to nawet dla najdłuższych CNH). Ujawniał się tu wpływ obecności części stożkowej, w której dzięki wysokiej energii oddziaływań adsorbowały się preferencyjnie cząsteczki CO_2 . Dodatkowo proste rozważania geometryczne wskazują, że efektywność rozdziału badanej mieszaniny wzrasta wraz ze wzrostem stosunku powierzchni do objętości porów adsorbentu (S/V). Finalnie w pracy [H11] zaproponowano empiryczne zależności pozwalające na przewidywanie wartości równowagowego współczynnika rozdziału dla CNH o określonej wartości S/V (dla różnego składu fazy objętościowej oraz jej ciśnienia całkowitego).

(d) Grafen

Ostatnią grupą rozważanych nanomateriałów stanowiły układy zawierające grafen [H13, H18]. Modelowałem jeden aspekt heterogeniczności tej nanoformy węgla – pofałdowanie powierzchni. W tym celu zaproponowałem autorską procedurę generowania stabilnych energetycznie pofałdowanych płaszczyzn grafenowych [H13]. Składała się ona z dwóch etapów: deformacji idealnego grafenu zgodnie z równaniem sinusoidalnym oraz relaksacji uzyskanych układów z wykorzystaniem symulacji MC. Wygenerowałem serię płaszczyzn o różnej amplitudzie sfałdowania. Zostały one następnie wykorzystane do konstrukcji układów porowatych zawierających pory

szczelinopodobne, w których płaszczyzny ułożone były równoległe [H13] lub były wzajemnie przesunięte (systematyczne zmiany od układu równoległego do antyrównoległego) [H18]. Tego typu struktury są nie tylko reprezentacją hipotetycznych nowych adsorbentów bazujących na grafenie, ale również mogą być traktowane jako układ modelowy do badań dotyczących wpływu stopnia sfałdowania ścian porów rzeczywistych adsorbentów węglowych na ich właściwości adsorpcyjne.

Wygenerowane struktury z układem porów szczelinowych zbudowanych z pofałdowanych płaszczyzn grafenowych wykorzystałem następnie do modelowania adsorpcji Ar [H18] oraz mieszanin gazów (CO_2/CH_4 , CO_2/N_2 [H13] oraz CO_2/CH_4 , CO_2/N_2 , CH_4/N_2 [H18]). Wyniki wykonanych symulacji potwierdzają istotną poprawę właściwości adsorpcyjnych związaną z pofałdowaniem ścian porów w porównaniu z układami zbudowanymi z idealnych płaszczyzn węglowych umieszczonych w analogicznej odległości. Jest to konsekwencją wzrostu energii oddziaływań cząsteczek adsorbatów ze strukturą adsorbentu. W przypadku równoległego układu płaszczyzn [H13] najlepsze właściwości separacyjne wykazywały układy zbudowane z płaszczyzn o wysokim stopniu sfałdowania (duże wartości amplitudy) umieszczonych w niewielkich odległościach. Taka geometria wiązała się w powstawaniem wąskich porów, w których wzmocnienie energii oddziaływań związane z nakładaniem oddziaływań z sąsiednimi fragmentami ścian było maksymalizowane. Badania nad wpływem wzajemnego ułożenia ścian [H18] wymagały zastosowania większych odległości międzypłaszczyznowych (aby zapewnić swobodę ich przesuwania). W związku z tym, w przypadku ułożenia równoległego efektywność adsorpcji i rozdziału była konsekwencją oddziaływań głównie z jedną ze ścian i, co za tym idzie, była mniejsza niż dla powyżej opisanej geometrii optymalnej. Jednakże dzięki sfałdowaniu badane układy wykazywały wciąż właściwości lepsze niż układy odniesienia zbudowane z idealnych płaszczyzn grafenowych. O wiele lepsza efektywność cechowała układy, w których ułożenie płaszczyzn było antyrównoległe (lub zbliżone). W tym przypadku pomiędzy uwypukleniami sąsiednich płaszczyzn powstawały wąskie pory. Co ciekawe najlepsze właściwości adsorpcyjne (dla najmniejszej spośród rozważanych odległości międzypłaszczyznowych) wykazywały układy o przesunięciu pośrednim między równoległym a antyrównoległym. W tym przypadku powstawała największa ilość porów o odpowiednio małej szerokości. Finalnie porównanie skuteczności rozdziału mieszanin przez najlepsze spośród badanych adsorbentów grafenowych oraz przez inne adsorbenty (węgle aktywne i nanorurki węglowe) charakteryzujących się podobnym stosunkiem pola powierzchni do objętości porów i/lub podobnym rozmiarem porów wskazuje na istotną przewagę tych pierwszych.

(e) Nowe modele matematyczne

Jak wcześniej wspominałem, część danych uzyskanych w ramach prezentowanego cyklu prac była analizowana z wykorzystaniem istniejących modeli matematycznych izoterm adsorpcji, np. równania DA [H1, H2, H5, H8] czy CMMS [H9]. Wykonane obliczenia potwierdziły ich użyteczność podczas ilościowego opisu związku pomiędzy parametrami strukturalnymi adsorbentu

czy chemiczną naturą jego powierzchni a właściwościami adsorpcyjnymi. Jednakże analiza części danych uzyskanych w ramach prezentowanego cyklu prac wymagała opracowania nowych modeli matematycznych izoterm adsorpcji. W związku z tym, opracowałem dwa nowe modele teoretyczne [H14, H16]. Punktem wyjścia dla obydwu był uogólniony model D'Arcy'ego i Watta (ang. generalized D'Arcy and Watt, GDW) zaproponowany wcześniej przeze mnie i współpracowników [PA12, PP2]. Model ten zakłada dwuetapowy proces adsorpcji: adsorpcję na pierwotnych centrach adsorpcyjnych (opisywaną za pomocą równania Langmuira) oraz adsorpcję na wtórnych centrach adsorpcyjnych, którymi stają się cząsteczki związane z centrami pierwotnymi (opisywaną przez równania Dubinina-Serpinskiego – DS). Równanie GDW pozwala na opis izoterm należących do typu I, II oraz III (zgodnie z klasyfikacją IUPAC). Wcześniej zaproponowałem również modyfikację tego modelu zakładającą heterogeniczność pierwotnych centrów adsorpcyjnych (ang. mult-site GDW model, MSGDW) [PA12, PP2]. Jednakże analiza przebiegów doświadczalnej entalpii adsorpcji wody dla siedmiu próbek nanorurek węglowych rozważanych w pracy [H14] ujawniła, że w przypadku niektórych próbek efekty związane z heterogenicznością występują nie tylko w obszarze adsorpcji monowarstwowej, ale również dla wyższych wartości adsorpcji (w obszarze adsorpcji wielowarstwowej). W związku z tym, w celu jednoczesnego opisu izoterm adsorpcji oraz związanej z nimi entalpii zaproponowałem model matematyczny uwzględniający nie tylko heterogeniczność centrów pierwotnych, ale również wtórnych [H14]. Równanie to można nazwać podwójnie heterogenicznym modelem GDW (ang. double heterogeneous GDW, dh-GDW). Takie podejście pozwoliło na doskonały opis wszystkich rozważanych danych doświadczalnych. Uzyskane wartości parametrów najlepszego dopasowania umożliwiły szczegółową analizę mechanizmu procesu adsorpcji. Finalnie (biorąc pod uwagę również inne analizowane dane) pozwoliło to na zaproponowanie ogólnego mechanizmu adsorpcji wody na nanorurkach węglowych (Rys. 13 w [H14]).

Drugi spośród nowych modeli matematycznych opracowałem dla potrzeb analizy adsorpcji acetonitrylu w porach modelowych węgla (zjawisko to symulowałem w pracy [H16]). Ponieważ uzyskane izotermy adsorpcji należały do typów I, IV lub V, zastosowanie do ich opisu oryginalnego modelu GDW było niemożliwe. W związku z tym, konieczna stała się jego modyfikacja. Po pierwsze założyłem, że każda cząsteczka związana z centrum pierwotnym staje się jednym centrum wtórnym. Takie założenie powoduje, że równaniu GDW upraszcza się do modelu Guggenheima-Andersona-de Boera (GAB) [PA8, PA12]. Następnie zastąpiłem proste równanie DS w członie opisującym adsorpcję na centrach wtórnych przez wcześniej zaproponowane przeze mnie i wsp. uogólnione równanie Bartona [PA12, PP2], które uwzględnia skończoną objętość porów. Tak zdefiniowany model może być określony jako analog równania GAB dla skończonej objętości porów (ang. finite pore volume GAB, fpv-GAB). Jego zastosowanie umożliwiło znakomity opis wszystkich izoterm adsorpcji CH₃CN rozważanych w pracy [H16]. Przyczyniło się również do ilościowego opisu wcześniej opisanych (punkt (a)) zależności pomiędzy porowatością lub zawartością tlenu a adsorpcją acetonitrylu. Warto

również podkreślić, iż zaproponowany przeze mnie model (fpv-GAB) jest jednym z nielicznych dających możliwość opisu izoterm należących do typów I, IV oraz V.

Podsumowanie

Prezentowany cykl prac jest odpowiedzią na lukę istniejącą w opisanych w literaturze badaniach teoretycznych dotyczących modelowania struktury adsorbentów węglowych oraz korelacji pomiędzy parametrami strukturalnymi czy zawartością grup powierzchniowych a właściwościami adsorpcyjnymi. Niedostatki dotychczasowego stanu badań są związane przede wszystkim ze skąpą ilością czy wręcz brakiem serii struktur modelowych o systematycznie zmieniającej się strukturze i/lub zawartości heteroatomów. W związku z tym, głównymi elementami nowości naukowej prac będących podstawą mojego wniosku są:

- (a) autorskie serie modeli struktury węgla aktywnych i nowych nanomateriałów węglowych, których właściwości zmieniają się w kontrolowany sposób,
- (b) wykonanie badań symulacyjnych mających na celu określenie zależności pomiędzy strukturą i/lub zawartością grup tlenowych a właściwościami adsorpcyjnymi rozważanych adsorbentów.

W ramach realizacji postawionych celów wygenerowałem kilka autorskich serii węgla wirtualnych o systematycznie zmieniającej się porowatości i/lub zawartości grup tlenowych. Uzupełniając wykorzystałem również WWP bazujące na modelu zaproponowanym przez Harrisa i wsp. oraz replikę rzeczywistego węglowego sita molekularnego. Wykonując symulacje adsorpcji gazów obojętnych (Ar, N₂) dla poszczególnych WWP zaobserwowałem zmiany podobne do tych obserwowanych doświadczalnie dla węgla różniących się strukturą porowatą. Fakt ten oraz zgodność mikrostruktury węgla modelowych z obserwacjami poczynionymi techniką mikroskopii elektronowej dla węgla rzeczywistych potwierdzają realistyczność uzyskanych WWP. W związku z tym, rozważane struktury modelowe wydają się być dogodnym narzędziem teoretycznym, które w połączeniu z modelowaniem molekularnym pozwala na bezpośredni wgląd w mechanizm procesu adsorpcji. Dzięki temu mogłem zająć się modelowaniem adsorpcji innych gazów (oraz ich mieszanin) o istotnym znaczeniu praktycznym. Wykonane symulacje pozwoliły na określenie oraz wyjaśnienie zależności pomiędzy strukturą porowatą węgla i/lub chemiczną naturą ich powierzchni a właściwościami adsorpcyjnymi. Uzyskane wyniki poszerzając stan wiedzy mogą przyczynić się do optymalizacji procesów, w których węgle aktywne są wykorzystywane jako adsorbenty.

Poza węglami aktywnymi modelowałem również strukturę i właściwości adsorpcyjne wybranych nowych nanomateriałów węglowych (nanorurek, nanorogów oraz grafenu). Dla potrzeb tej części prezentowanego cyklu prac wygenerowałem autorskie modele struktury tych ciał stałych. Podobnie, jak w przypadku węgla aktywnych, starałem się otrzymać serie adsorbentów modelowych pozwalające na systematyczne badania zależności pomiędzy ich strukturą a właściwościami adsorpcyjnymi. Otrzymałem między innymi serię nanorurek węglowych różniących się stopniem heterogeniczności ich powierzchni. Wyniki symulacji adsorpcji benzenu wykonanych dla tych

układów wykazywały zgodność z obserwacjami doświadczalnymi poczynionymi dla serii CNT o różnym stopniu modyfikacji ich powierzchni. Wygenerowałem również kilka serii nanorogów węglowych różniących się parametrami geometrycznymi. Według mojej wiedzy praca [H6], w której wraz ze współpracownikami opisałem otrzymane wyniki, była pierwszym doniesieniem literaturowym dotyczącym wygenerowania serii realistycznych modeli atomowych pojedynczych CNH. Wykonane symulacje procesu adsorpcji we wnętrzu CNH potwierdziły, że dzięki wysokiej energii adsorpcji w części stożkowej w pewnych zastosowaniach nanorogi węglowe mogą mieć istotną przewagę nad nanorurkami. Finalnie, modelowałem również jeden aspekt heterogeniczności grafenu, tj. pofałdowanie jego powierzchni. Konstruując układy porowate z tego typu płaszczyzn grafenowych oraz wykonując symulacje procesu adsorpcji wykazałem, iż są one o wiele efektywniejszymi adsorbentami niż układy zbudowane z idealnych płaszczyzn grafenowych.

W ramach modelowania właściwości adsorpcyjnych rozważanych adsorbentów symulowałem przede wszystkim adsorpcję gazów o znaczeniu praktycznym: gazów obojętnych powszechnie stosowanych do charakteryzacji porowatości adsorbentów (Ar , N_2) czy też wywierających negatywny wpływ na środowisko naturalne, jak SO_2 , gazy cieplarniane (SF_6 , CF_4) oraz lotne związki organiczne (benzen, acetonitryl). Symulowałem również adsorpcję dwuskładnikowych mieszanin gazów o istotnym znaczeniu praktycznym – głównie układy CO_2/N_2 , CO_2/CH_4 oraz CH_4/N_2 .

Uzupełnieniem bezpośrednich symulacji procesu adsorpcji było wykorzystanie teoretycznych równań izoterm adsorpcji do ilościowej analizy uzyskanych danych. W ramach realizacji postawionych celów wyprowadziłem dwa nowe modele matematyczne: dh-GDW oraz fpv-GAB. Warto pokreślić, iż autorskie równanie fpv-GAB jest jednym z niewielu modeli teoretycznych pozwalających na jednoczesny opis izoterm typów I, IV oraz V.

Badania leżące u podstaw prezentowanego cyklu prac mają charakter badań podstawowych. W związku z tym, przede wszystkim pogłębiają wiedzę na temat procesu adsorpcji w porach materiałów węglowych oraz określają i wyjaśniają zależności pomiędzy strukturą porowatą i/lub zawartością grup tlenowych a właściwościami adsorpcyjnymi rozważanych adsorbentów. Uzyskane wyniki mogą także mieć znaczenie praktyczne. Zaobserwowane prawidłowości pozwalają na wskazanie kierunku syntezy i/lub modyfikacji nanowęgli dla określonych zastosowań adsorpcyjnych. Mogą też stać inspiracją dla prób syntezy nowych adsorbentów węglowych, np. opartych na pofałdowanym grafenie.

Pozostałe obszary zainteresowań naukowych

Prace wchodzące w skład prezentowanego cyklu wpisują się w główny obszar moich zainteresowań naukowych, który obejmuje badania teoretyczne dotyczące adsorpcji (głównie z fazy gazowej) na materiałach węglowych z wykorzystaniem symulacji Monte Carlo oraz modeli teoretycznych izoterm adsorpcji. Oprócz tego współuczestniczyłem również w innych badaniach (zarówno teoretycznych jak i doświadczalnych) wykraczających poza ten obszar. Między innymi,

brałem udziałem w pracach poświęconych modelowaniu adsorpcji z fazy ciekłej wykorzystujących symulacje metodami dynamiki molekularnej [PA23, PA25, PA30, PA35, PA37, PA42, PA51, PB3, PB5]. Wśród najważniejszych wyników tych badań można wymienić wyjaśnienie wpływu obecności grup powierzchniowych na mechanizm immersji węgla w wodzie (zgodnie z teorią Pratta–Chandlera) [PA30] czy wykazanie, że obserwowane doświadczalnie obniżenie adsorpcji niektórych związków organicznych z roztworów wodnych na skutek utlenienia powierzchni węgla jest głównie konsekwencją blokowania porów przez klasterki cząsteczek wody formujące się wokół grup polarnych [PA42].

Swoje doświadczenia zdobyte podczas opisu izoterm adsorpcji różnych gazów na materiałach węglowych za pomocą równań teoretycznych wykorzystałem z powodzeniem podczas modelowania sorpcji pary wodnej przez produkty żywnościowe [PA7, PA8, PA21, PA38, PP4-PP6, PM2], drewno [PB2] czy materiały budowlane [PA45, PA53]. W pracach tych udowodniono, że zaproponowane przeze mnie i wsp. równanie izoterm GDW jest jednym z najbardziej uniwersalnych modeli teoretycznych pozwalających na opis różnych typów izoterm obserwowanych dla tych układów w całym zakresie aktywności wody [PA21]. Model GDW daje również prostą możliwość wglądu w termodynamikę procesu sorpcji (przy jednoczesnym wielotemperaturowym opisie izoterm) [PA7, PA8, PA38, PA53, PM2] oraz pozwala na łatwe określenie typu izoterm [PA38].

Dalsze plany badawcze

W swoich dalszych badaniach zamierzam kontynuować badania teoretyczne (głównie z wykorzystaniem symulacji Monte Carlo) dotyczące właściwości adsorpcyjnych materiałów węglowych. Moje plany na najbliższy czas wiążą się z realizacją projektu badawczego dotyczącego modelowania reakcji chemicznych w porach węglowych (patrz punkt 5b). W ramach tego zadania pracuję aktualnie nad poszerzeniem mojego warsztatu o symulacje MC w zespołach reakcyjnych. Technika ta zostanie wykorzystana do systematycznych badań dotyczących wpływu zamknięcia w nanoporach na stan równowagi reakcyjnej.

Literatura

Odnosić rozpoczynające się od litery H (np. [H1]) odnoszą się prac wchodzących w skład cyklu wyszczególnionych we wcześniejszej części w punkcie 4b. Odnosić rozpoczynające się od litery P (np. [PA9], [PB1], [PM11], [PP2]) odnoszą się do pozostałych prac autora i wsp. wyszczególnionych w dalszej części w punkcie 5a. Pozostałe odnośniki zestawiono poniżej:

- [1] A. Dąbrowski, Adsorption and its Application in Industry and Environmental Protection. Elsevier, Amsterdam 1999
- [2] R.C. Bansal, M. Goyal, Activated Carbon Adsorption. CRC Press, Boca Raton 2005
- [3] T.J. Bandoz (ed.), editor. Activated Carbon Surfaces in Environmental Remediation. Academic Press, New York, 2006
- [4] Y. Gogotsi, V. Presser, Carbon Nanomaterials. CRC Press 2013

- [5] D. Tomanek, *Guide Through the Nanocarbon Jungle*. Morgan & Claypool Publishers, San Rafael 2014
- [6] C.P. Bergmann, F. Machado (Eds), *Carbon Nanomaterials as Adsorbents for Environmental and Biological Applications*. Springer International Publishing, 2015
- [7] M.J. Biggs, A. Buts, *Molecular Simulation* 32 (2006) 579
- [8] M.J. Biggs, A. Buts, D. Williamson, *Langmuir* 20 (2004) 5786
- [9] M.J. Biggs, A. Buts, D. Williamson, *Langmuir* 20 (2004) 7123
- [10] P.J.F. Harris, S.C. Tsang, *Philosophical Magazine A* 76 (1997) 667
- [11] P.J.F. Harris, *International Materials Reviews* 42 (1997) 206
- [12] P.J.F. Harris, *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences* 30 (2005) 235
- [13] E. Di Biase, L. Sarkisov, *Carbon* 64 (2013) 262
- [14] R.C. Powles, N.A. Marks, D.W.M. Lau, *Physical Review B* 79 (2009) 075430
- [15] A. Kumar, R.F. Lobo, N.J. Wagner, *AIChE Journal* 57 (2011) 1496
- [16] G. Opletal, T. Petersen, B. O'Malley, I. Snook, D.G. McCulloch, N.A. Marks, I. Yarovsky, *Molecular Simulation* 28 (2002) 927
- [17] S.K. Jain, R.J.-M. Pellenq, J.P. Pikunic, K.E. Gubbins, *Langmuir* 22 (2006) 9942
- [18] T.X. Nguyen, N. Cohaut, J.-S. Bae, S.K. Bhatia, *Langmuir* 24 (2008) 7912
- [19] S.K. Jain, K.E. Gubbins, R.J.-M. Pellenq, J.P. Pikunic, *Carbon* 44 (2006) 2445
- [20] A.H. Farmahini, S.K. Bhatia, *Molecular Simulation* 41 (2015) 432
- [21] R. Majidi, K.G. Tabrizi, *Physica B* 405 (2010) 2144
- [22] A. Gotzias, H. Heiberg-Andersen, M. Kainourgiakis, Th. Steriotis, *Carbon* 49 (2011) 2715
- [23] H. Tanaka, J. Fan, H. Kanoh, M. Yudasaka, S. Iijima, K. Kaneko, *Molecular Simulation* 31 (2005) 465
- [24] S. Hashimoto, T. Fujimori, H. Tanaka, K. Urita, T. Ohba, H. Kanoh, T. Itoh, M. Asai, H. Sakamoto, S. Niimura, M. Endo, F. Rodriguez-Reinoso, K. Kaneko, *Journal of the American Chemical Society* 133 (2011) 2022
- [25] T. Ohba, K. Kaneko, M. Yudasaka, S. Iijima, A. Takase, H. Kanoh, *Journal of Physical Chemistry C* 116 (2012) 21870
- [26] H. Tanaka, H. Kanoh, M. Yudasaka, S. Iijima, K. Kaneko, *Journal of the American Chemical Society* 127 (2005) 7511
- [27] T. Ohba, H. Kanoh, M. Yudasaka, S. Iijima, K. Kaneko, *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 8659
- [28] L. Hawelek, A. Brodka, J.C. Dore, A.C. Hannon, S. Iijima, M. Yudasaka, T. Ohba, K. Kaneko, A. Burian, *Journal of Physical Chemistry A* 117 (2013) 9057
- [29] M. Kruk, M. Jaroniec, K.P. Gadkaree, *Langmuir* 15 (1999) 1442

5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo – badawczych, dydaktycznych i organizacyjnych

5a) Wykaz innych prac naukowych (niewchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt 4)

Czasopisma z części A Wykazu Czasopism Naukowych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego (czasopisma naukowe posiadające współczynnik wpływu impact factor (IF), znajdujące się w bazie Journal Citation Reports (JCR)):

przed uzyskaniem stopnia doktora:

- [PA1] R.P. Wesołowski, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, THE APPLICABILITY OF THE NUMERICAL ALGORITHM FOR THE EVALUATION OF ISOSTERIC HEAT OF ADSORPTION *Carbon* 42 (2004) 53-58

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.
Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA2] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P. Kowalczyk, J.K. Garbacz, IMPACT OF AN ADSORBED PHASE NONIDEALITY IN THE CALCULATION OF FILLING PRESSURE OF CARBON SLIT-LIKE MICROPORES *Carbon* 42 (2004) 573-583

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń.
Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PA3] **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, G. Rychlicki, R.P. Wesołowski, P. Kowalczyk, HETEROGENEOUS DO-DO MODEL OF WATER ADSORPTION ON CARBONS *Journal of Colloid and Interface Science* 290 (2005) 1-13

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wyprowadzenie analogów równania Do-Do uwzględniających heterogeniczność centrów adsorpcyjnych; wyprowadzenie odpowiednich zależności opisujących energetykę procesu adsorpcji wody na materiałach węglowych; wykonanie części obliczeń; współudział w analizie i interpretacji wyników.
Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PA4] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, G. Rychlicki, PARAMETERISATION OF THE CORECTED DUBININ-SERPINSKY ADSORPTION ISOTHERM EQUATION *Journal of Colloid and Interface Science* 291 (2005) 600-605

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: przegląd literatury; wykonanie części obliczeń; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

- [PA5] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, G. Rychlicki, SIMPLE MODEL OF ADSORPTION IN NANOTUBES *Journal of Colloid and Interface Science* 295 (2006) 310-317

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie modeli matematycznych; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PA6] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, G.S. Szymański, P.A. Gauden, M. Motak, P. Kowalczyk, G. Rychlicki, THERMODYNAMICS OF THE CMMS APPROACH AND CARBON SURFACE CHEMISTRY IN SO₂ ADSORPTION *Langmuir* 22 (2006) 6887-6892

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PA7] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, G. Rychlicki, APPLICABILITY OF THE GENERALISED D'ARCY AND WATT MODEL TO DESCRIPTION OF WATER SORPTION ON PINEAPPLE AND OTHER FOODSTUFFS *Journal of Food Engineering* 79 (2007) 718-723

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PA8] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, THE GENERAL MECHANISM OF WATER SORPTION ON FOODSTUFFS – IMPORTANCE OF THE MULTITEMPERATURE FITTING OF DATA AND HIERARCHY OF MODELS *Journal of Food Engineering* 82 (2007) 528-535

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PA9] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, J. Włoch, P. Kowalczyk, HYPERPARALLEL TEMPERING MONTE CARLO SIMULATIONS OF Ar ADSORPTION IN NEW MODELS OF MICROPOROUS NON-GRAPHITIZING ACTIVATED CARBON: EFFECT OF MICROPOROSITY *Journal of Physics: Condensed Matter* 19 (2007) 406208-1-17

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w stworzeniu wirtualnego modelu budowy węgla „twardych”; wykonanie części obliczeń (wykonanie symulacji komputerowych izoterm adsorpcji, wyznaczenie rozkładów rozmiarów porów w oparciu o metodę BG); współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA10] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.J.F. Harris, P.A. Gauden, J. Włoch, P. Kowalczyk, G. Rychlicki, HOW REALISTIC IS THE PORE SIZE DISTRIBUTION CALCULATED FROM ADSORPTION ISOTHERMS USING STANDARD METHODS? *Physical Chemistry Chemical Physics* 9 (2007) 5919-5929

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w stworzeniu wirtualnego modelu budowy węgla „twardych”; wykonanie części obliczeń (wykonanie symulacji komputerowych izoterm adsorpcji, wyznaczenie rozkładów rozmiarów porów w oparciu o metodę BG); współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA11] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, K. Lota, E. Frąckowiak, F. Béguin, P. Kowalczyk, DETERMINATION OF THE SPACE BETWEEN CLOSED MULTIWALLED CARBON NANOTUBES BY GCMC SIMULATION OF NITROGEN ADSORPTION *Journal of Colloid and Interface Science* 317 (2008) 442-448

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji MC; opracowanie algorytmu wyznaczającego funkcję rozkładu rozmiarów porów; współudział w wykonaniu obliczeń; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 35 %.

- [PA12] **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, G. Rychlicki, WATER ADSORPTION ON CARBONS – CRITICAL REVIEW OF THE MOST POPULAR ANALYTICAL APPROACHES *Advances in Colloid and Interface Science* 137 (2008) 82-143

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wyprowadzenie nowych modeli adsorpcji opisujących mechanizm adsorpcji wody na materiałach węglowych; wykonanie części obliczeń; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 35 %.

- [PA13] A.P. Terzyk, M. Wiśniewski, P.A. Gauden, G. Rychlicki, **S. Furmaniak**, CARBON SURFACE CHEMICAL COMPOSITION IN PARANITROPHENOL ADSORPTION DETERMINED AT THE REAL OXIC AND ANOXIC CONDITIONS *Journal of Colloid and Interface Science* 320 (2008) 40-51

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA14] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, P. Kowalczyk, HETEROGENEITY ON HIGH-RESOLUTION α_s PLOTS FOR CARBON NANOTUBES – GCMC STUDY *Physical Chemistry Chemical Physics* 10 (2008) 4551-4554

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (symulacje GCMC adsorpcji azotu na zdefektowanych nanorurkach węglowych); współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA15] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, J. Włoch, TESTING ISOTHERM MODELS AND RECOVERING EMPIRICAL RELATIONSHIPS FOR ADSORPTION IN MICROPOROUS CARBONS USING VIRTUAL CARBON MODELS AND GRAND CANONICAL MONTE CARLO SIMULATIONS *Journal of Physics: Condensed Matter* 20 (2008) 385212-1-15

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w stworzeniu wirtualnego modelu budowy węgla „twardych”; wykonanie części obliczeń (wykonanie symulacji komputerowych izoterm adsorpcji, wyznaczenie rozkładów porów w oparciu o metodę BG); współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA16] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, M. Jaroniec, ARGON ADSORPTION IN CHANNEL-LIKE MESOPOROUS CARBONS AT 77 K, GCMC SIMULATIONS AND PORE SIZE ANALYSIS *Microporous and Mesoporous Materials* 116 (2008) 665-669

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; wykonanie wszystkich symulacji MC; współudział w wykonaniu obliczeń; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PA17] P. Kowalczyk, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, IMPACT OF THE CARBON PORE SIZE AND TOPOLOGY ON THE EQUILIBRIUM QUANTUM SIEVING OF HYDROGEN ISOTOPES AT ZERO COVERAGE AND FINITE PRESSURES, *Journal of Physics: Condensed Matter* 21 (2009) 144210-1-12

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA18] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P. Kowalczyk, ADSORPTION POTENTIAL DISTRIBUTIONS FOR CARBONS HAVING DEFINED PORE STRUCTURE – GCMC SIMULATIONS OF THE EFFECT OF HETEROGENEITY, *Adsorption* 15 (2009) 99-113

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (symulacje GCMC); współudział w weryfikacji i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PA19] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, R.P. Wesołowski, P. Kowalczyk, Ar, CCl₄, AND C₆H₆ ADSORPTION OUTSIDE AND INSIDE OF THE BUNDLES OF MULTI-WALLED CARBON NANOTUBES – SIMULATION STUDY *Physical Chemistry Chemical Physics* 11 (2009) 4982-4995

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (symulacje GCMC); współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA20] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, P. Kowalczyk, CAN CARBON SURFACE OXIDATION SHIFT THE PORE SIZE DISTRIBUTION CURVE CALCULATED FROM Ar, N₂ AND CO₂ ADSORPTION ISOTHERMS? SIMULATION RESULTS FOR A REALISTIC CARBON MODEL *Journal of Physics: Condensed Matter* 21 (2009) 315005-1-10

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (symulacje GCMC, algorytm imitujący utlenianie wirtualnych węgli); współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA21] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, R. Gołębiewski, P.A. Gauden, L. Czepirski, SEARCHING THE MOST OPTIMAL MODEL OF WATER SORPTION ON FOODSTUFFS IN THE WHOLE RANGE OF RELATIVE HUMIDITY *Food Research International* 42 (2009) 1203-1214

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 60 %.

- [PA22] P. Kowalczyk, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, FREQUENCY-DEPENDENT DIFFUSION CONSTANT OF QUANTUM FLUIDS FROM PATH INTEGRAL MONTE CARLO AND TIKHONOV'S REGULARIZING FUNCTIONAL *Journal of Chemical Theory and Computation* 5 (2009) 1990-1996

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA23] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P.J.F. Harris, P. Kowalczyk, ADSORPTION FROM AQUEOUS SOLUTIONS ON OPENED CARBON NANOTUBES – ORGANIC COMPOUNDS SPEED UP DELIVERY OF WATER FROM INSIDE *Physical Chemistry Chemical Physics* 11 (2009) 9341-9345

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (rozkłady gęstości, histogramy obrazujące orientację cząsteczek adsorbentu w stosunku do powierzchni wewnętrznej oraz zewnętrznej rurek węglowych); współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PA24] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, FULLERENE INTERCALATED GRAPHENE NANOCONTAINERS – THE MECHANISM OF Ar ADSORPTION AND THE TEST OF HIGH PRESSURE CH₄ AND CO₂ STORAGE CAPACITIES *Adsorption Science and Technology* 27 (2009) 281-296

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wygenerowanie wszystkich komórek symulacyjnych; wykonanie symulacji izoterm adsorpcji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA25] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P.J.F. Harris, MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION INSIGHT INTO THE MECHANISM OF PHENOL ADSORPTION AT LOW COVERAGES FROM AQUEOUS SOLUTIONS ON MICROPOROUS CARBONS *Physical Chemistry Chemical Physics* 12 (2010) 812-817

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (obróbkę i analizę wyników otrzymanych w wyniku symulacji MD); współudział w weryfikacji i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 15 %.

- [PA26] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, P. Kowalczyk, THE INFLUENCE OF CARBON SURFACE OXYGEN GROUPS ON DUBININ-ASTAKHOV EQUATION PARAMETERS CALCULATED FROM CO₂ ADSORPTION ISOTHERM *Journal of Physics: Condensed Matter* 22 (2010) 085003-1-10

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (symulacje GCMC, wirtualnie utlenianie); współudział w weryfikacji i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA27] P. Kowalczyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, CARBON DIOXIDE ADSORPTION-INDUCED DEFORMATION OF MICROPOROUS CARBONS *Journal of Physical Chemistry C* 114 (2010) 5126-5133

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie części symulacji MC; współudział w wykonaniu obliczeń; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

- [PA28] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.J.F. Harris, P. Kowalczyk, BET SURFACE AREA OF CARBONACEOUS ADSORBENTS – VERIFICATION USING GEOMETRIC CONSIDERATIONS ON VIRTUAL POROUS CARBON MODELS *Applied Surface Science* 256 (2010) 5204-5209

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (obliczenia GCMC); współudział w weryfikacji i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA29] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, G. Rychlicki, M. Wiśniewski, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, K.M. Werengowska, K. Dulka, THE SYSTEM: CARBON TETRACHLORIDE – CLOSED CARBON NANOTUBES ANALYSED BY A COMBINATION OF MOLECULAR SIMULATIONS, ANALYTICAL MODELLING AND ADSORPTION CALORIMETRY *Journal of Colloid and Interface Science* 349 (2010) 321-330

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji MC; opracowanie modeli matematycznych; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 35 %.

- [PA30] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P. Kowalczyk, ACTIVATED CARBON IMMERSSED IN WATER – THE ORIGIN OF LINEAR CORRELATION BETWEEN ENTHALPY OF IMMERSION AND OXYGEN CONTENT STUDIED BY MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION *Physical Chemistry Chemical Physics* 12 (2010) 10701-10713

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń (geometryczne rozkłady rozmiarów porów, obróbka i analiza wyników ze stanu równowagi, wirtualne utlenianie węgla); współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PA31] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, M. Wiśniewski, P. Kowalczyk, SIMPLE MODEL OF ADSORPTION ON EXTERNAL SURFACE OF CARBON NANOTUBES – A NEW ANALYTICAL APPROACH BASING ON MOLECULAR SIMULATION DATA *Adsorption* 16 (2010) 197-213

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji MC; opracowanie modeli matematycznych; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PA32] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, R. Gołembiewski, P.A. Gauden, SURFACE AREA OF CLOSED CARBON NANOTUBES DETERMINED FROM ROOM TEMPERATURE MEASUREMENTS OF ALCOHOLS ADSORPTION *Chemical Physics Letters* 499 (2010) 141-145

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opis wszystkich danych za pomocą modelu teoretycznego; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PA33] P. Kowalczyk, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, MICROSCOPIC MODEL OF CARBONACEOUS NANOPOROUS MOLECULAR SIEVES ANOMALOUS TRANSPORT IN MOLECULARLY CONFINED SPACES *Physical Chemistry Chemical Physics* 12 (2010) 11351-11361

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w weryfikacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA34] P. Kowalczyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, AN OPTIMAL SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE VESSELS FOR SHORT TERM REVERSIBLE STORAGE OF CARBON DIOXIDE AT AMBIENT TEMPERATURES *Journal of Physical Chemistry C* 114 (2010) 21465-21473

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji MC; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

po uzyskaniu stopnia doktora:

- [PA35] R.P. Wesołowski, **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, SIMULATING THE EFFECT OF CARBON NANOTUBE CURVATURE ON ADSORPTION OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS *Adsorption* 17 (2011) 1-4

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PA36] J.K. Garbacz, **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, M. Grabiec, NEW MODEL DESCRIBING ADSORPTION FROM LIQUID BINARY MIXTURES OF NONELECTROLYTES WITH LIMITED AND UNLIMITED MISCIBILITY OF COMPONENTS *Journal of Colloid and Interface Science* 359 (2011) 512-519

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

- [PA37] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, R. Pieńkowski, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P. Kowalczyk, MOLECULAR DYNAMICS OF ZIGZAG SINGLE WALLED CARBON NANOTUBES IMMERSION IN WATER *Physical Chemistry Chemical Physics* 13 (2011) 5621-5629

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie części obliczeń; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA38] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, SOME REMARKS ON THE CLASSIFICATION OF WATER VAPOR SORPTION ISOTHERMS AND BLAHOVEC AND YANNIOTIS ISOTHERM EQUATION *Drying Technology* 29 (2011) 984-991

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 60 %.

- [PA39] A. Pacholczyk, A.P. Terzyk, M. Wiśniewski, P.A. Gauden, R.P. Wesołowski, **S. Furmaniak**, A. Szcześ, E. Chibowski, B. Kruszka, PHENOL ADSORPTION ON CLOSED CARBON NANOTUBES *Journal of Colloid and Interface Science* 361 (2011) 288-292

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA40] P. Kowalczyk, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, QUANTUM FLUCTUATIONS INCREASE THE SELF-DIFFUSIVE MOTION OF PARA-HYDROGEN IN NARROW CARBON NANOTUBES *Physical Chemistry Chemical Physics* 13 (2011) 9824-9830

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA41] P. Kowalczyk, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, K. Kaneko, CRYOGENIC HELIUM ADSORBED IN ZEOLITE RHO: INSIDE LOCALIZATION CONTROLLED SELF-DIFFUSION OF CONFINED QUANTUM PARTICLES *Journal of Physical Chemistry C* 115 (2011) 18105-18110

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA42] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, W. Zieliński, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, K.K. Klimek, FIRST MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION INSIGHT INTO THE MECHANISM OF ORGANICS ADSORPTION FROM AQUEOUS SOLUTIONS ON MICROPOROUS CARBONS *Chemical Physics Letters* 515 (2011) 102-108

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA43] P. Kowalczyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, METHANE-INDUCED DEFORMATION OF POROUS CARBONS: FROM NORMAL TO HIGH-PRESSURE OPERATING CONDITIONS *Journal of Physical Chemistry C* 116 (2012) 1740-1747

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie części symulacji MC; współudział w wykonaniu obliczeń; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

- [PA44] P. Kowalczyk, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.J.F. Harris, DISPLACEMENT OF METHANE BY COADSORBED CARBON DIOXIDE IS FACILITATED IN NARROW CARBON NANOPORES *Journal of Physical Chemistry C* 116 (2012) 13640-13649

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA45] **S. Furmaniak**, THE ALTERNATIVE MODEL OF WATER VAPOUR SORPTION IN POROUS BUILDING MATERIALS *Transport in Porous Media* 92 (2012) 21-23

- [PA46] M. Wiśniewski, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, P. Kowalczyk, A. Pacholczyk, **S. Furmaniak**, DETECTING ADSORPTION SPACE IN CARBON NANOTUBES BY BENZENE UPTAKE *Journal of Colloid and Interface Science* 391 (2013) 74-85

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA47] A.P. Terzyk, M. Wiśniewski, K. Dulcka, A. Bielicka, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, K. Werengowska-Ciećwierz, CARBON NANOTUBES AS POTENTIAL MATERIAL FOR DRUG DELIVERY – EXPERIMENT AND SIMULATION *Adsorption* 19 (2013) 269-272

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA48] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, M. Wiśniewski, P. Kowalczyk, A. Bielicka, W. Zieliński, POROSITY OF CLOSED CARBON NANOTUBES COMPRESSED USING HYDRAULIC PRESSURE *Adsorption* 19 (2013) 785-793

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PA49] A. Bielicka, M. Wiśniewski, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, K. Roszek, P. Kowalczyk, A. Bieniek, CARBON MATERIALS AS NEW NANOVEHICLES IN HOT-MELT DRUG DEPOSITION *Journal of Physics: Condensed Matter* 25 (2013) 355002-1-13

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA50] P. Kowalczyk, J. He, M. Hu, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, TO THE PORE AND THROUGH THE PORE: THERMODYNAMICS AND KINETICS OF HELIUM IN EXOTIC CUBIC CARBON POLYMORPHS *Physical Chemistry Chemical Physics* 15 (2013) 17366-17373

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA51] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, J. Włoch, P. Kowalczyk, W. Zieliński, MD SIMULATION OF ORGANICS ADSORPTION FROM AQUEOUS SOLUTION IN CARBON SLIT-LIKE PORES. FOUNDATIONS OF THE PORE BLOCKING EFFECT *Journal of Physics: Condensed Matter* 26 (2014) 055008-1-14

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PA52] P. Kowalczyk, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, K. Kaneko, TOWARD IN SILICO MODELING OF PALLADIUM – HYDROGEN – CARBON NANOHORN NANOCOMPOSITES *Physical Chemistry Chemical Physics* 16 (2014) 11763-11769

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wygenerowanie modelowych nanorogów; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA53] **S. Furmaniak**, MULTITEMPERATURE FITTING OF ISOTHERMS AS A SIMPLE METHOD OF INSIGHT INTO THE THERMODYNAMICS OF WATER SORPTION ON BUILDING MATERIALS *Bulgarian Chemical Communications* 46 (2014) 563-568

- [PA54] K. Werengowska-Ciećwierz, M. Wiśniewski, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, THE CHEMISTRY OF BIOCONJUGATION IN NANOPARTICLES-BASED DRUG DELIVERY SYSTEM *Advances in Condensed Matter Physics* 2015 (2015) 198175-1-27

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA55] P. Kowalczyk, A. Ciach, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, EFFECTS OF CRITICAL FLUCTUATIONS ON ADSORPTION-INDUCED DEFORMATION OF MICROPOROUS CARBONS *Journal of Physical Chemistry C* 119 (2015) 6111-6120

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PA56] P. Kowalczyk, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, E. Pantatosaki, G.K. Papadopoulos, INTRINSIC D₂/H₂ SELECTIVITY OF NaX ZEOLITE: INTERPLAY BETWEEN ADSORPTION AND KINETIC FACTORS *Journal of Physical Chemistry C* 119 (2015) 15373-15380

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA57] P. Kowalczyk, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, K. Kaneko, T.F. Miller, III, NUCLEAR QUANTUM EFFECTS IN THE LAYERING AND DIFFUSION OF HYDROGEN ISOTOPES IN CARBON NANOTUBES *Journal of Physical Chemistry Letters* 6 (2015) 3367-3372

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PA58] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, M. Wiśniewski, K. Werengowskaa, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, NEW FINDINGS ON THE INFLUENCE OF CARBON SURFACE CURVATURE ON ENERGETICS OF BENZENE ADSORPTION FROM GASEOUS PHASE *Chemical Physics Letters* 645 (2016) 157-163

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PA59] **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, P. Kowalczyk, GYROIDAL NANOPOROUS CARBONS – ADSORPTION AND SEPARATION PROPERTIES EXPLORED USING COMPUTER SIMULATIONS *Condensed Matter Physics* 19 (2016) 13003-1-14

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wykonanie wszystkich symulacji MC; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 60 %.

- [PA60] P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, J. Włoch, A.P. Terzyk, W. Zieliński, P. Kowalczyk, J. Kurzawa, THE INFLUENCE OF GEOMETRIC HETEROGENEITY OF CLOSED CARBON NANOTUBE BUNDLES ON BENZENE ADSORPTION FROM THE GASEOUS PHASE-MONTE CARLO SIMULATIONS *Adsorption* 22 (2016) 639-651

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; współudział w wykonaniu symulacji MC; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 35 %.

Czasopisma z części B Wykazu Czasopism Naukowych Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego:

przed uzyskaniem stopnia doktora:

- [PB1] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmانيak**, MODELE BUDOWY WĘGLA AKTYWNEGO W CZORAJ – DZISIAJ – JUTRO *Wiadomości Chemiczne* 62 (2008) 403-447

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: sporządzenie części manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PB2] **S. Furmانيak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, INTERRELATION BETWEEN STEAM SORPTION BY WOOD AND TEMPERATURE *Drewno. Prace Naukowe. Doniesienia. Komunikaty* 51 (2008) 15-29

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 60 %.

po uzyskaniu stopnia doktora:

- [PB3] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmانيak**, P. Kowalczyk, MATERIAL STORAGE MECHANISM IN POROUS NANOCARBON – COMPARISON BETWEEN EXPERIMENT AND SIMULATION *Computational Methods in Science and Technology* 18 (2012) 45-51

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 15 %.

- [PB4] A.P. Terzyk, **S. Furmانيak**, K. Kaneko, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, T. Itoh, NANOROGI WĘGLOWE – MODELOWANIE I WŁAŚCIWOŚCI ADSORPCYJNE *Inżynieria i Ochrona Środowiska* 16 (2013) 217-223

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w opracowaniu materiału oraz uzyskaniu wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PB5] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, M. Wiśniewski, A. Bielicka, K. Werengowska-Ciećwierz, W. Zieliński, B. Kruszka, A. Bieniek, MODELOWANIE ADSORPCJI ZWIĄZKÓW BIOLOGICZNIE CZYNNYCH NA MATERIAŁACH WĘGLOWYCH *Inżynieria i Ochrona Środowiska* 16 (2013) 225-234

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PB6] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, P.J.F. Harris, SYNERGICZNY WPŁYW WYMIARU NANOPORÓW WĘGLA AKTYWNEGO ORAZ UTLENIE NIE JEGO POWIERZCHNI NA ADSORPCJĘ CO₂ Z MIESZANIN CH₄/CO₂ *Inżynieria i Ochrona Środowiska* 16 (2013) 245-254

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie serii utlenionych WWP; charakteryzację wszystkich WWP; wykonanie wszystkich symulacji; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 45 %.

- [PB7] A. Bielicka, M. Wiśniewski, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, P. Kowalczyk, MATERIAŁY WĘGLOWE JAKO NOŚNIKI LEKÓW – WYKORZYSTANIE NOWATORSKIEJ METODY HMD (HOT-MELT DEPOSITION) W SYNTEZIE UKŁADÓW KONTROLOWANEGO UWALNIANIA PARACETAMOLU *Inżynieria i Ochrona Środowiska* 16 (2013) 323-330

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

Pozostałe czasopisma:

przed uzyskaniem stopnia doktora:

- [PP1] A.P. Terzyk, S. Koter, G. Rychlicki, R.P. Wesołowski, **S. Furmaniak**, P. Kowalczyk, M.S. Ćwiertnia, DESCRIPTION OF ADSORPTION IN MICROPOROUS CARBONS BASING ON THE CONCEPT OF THE ACTIVITY COEFFICIENT AND THE OSMOTIC EQUILIBRIUM *Biuletyn WICHiR* 34 (2004) 67-76

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w opracowaniu formalizmu matematycznego; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PP2] **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, A.P. Terzyk, R.P. Wesołowski, G. Rychlicki, IMPROVING THE FUNDAMENTAL IDEAS OF DUBININ, SERPINSKY AND BARTON – FURTHER INSIGHTS INTO THEORETICAL DESCRIPTION OF WATER ADSORPTION ON CARBONS *Annales UMCS (Sectio AA, Chemia)* 60 (2005) 151-182

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: zaproponowanie nowych równań opisujących adsorpcję i energetykę adsorpcji wody na materiałach węglowych; wykonanie części obliczeń; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PP3] A.P. Terzyk, S. Koter, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, INCORPORATING HETEROGENEITY INTO THE OSMOTIC THEORY OF ADSORPTION *Annales UMCS (Sectio AA, Chemia)* 62 (2007) 156-180

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w opracowaniu formalizmu matematycznego; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 15 %.

- [PP4] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, L. Czepirski, E. Komorowska-Czepirska, J. Szymońska, P.A. Gauden, MODELING OF SORPTION OF WATER ON POTATO AND ON POTATO STARCH *Food* 3 (2009) 13-17

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

po uzyskaniu stopnia doktora:

- [PP5] **S. Furmaniak**, SORPCJA WODY PRZEZ PRODUKTY ŻYWNOŚCIOWE (CZ. I) *LAB Laboratoria, Aparatura, Badania* 4/2013 (2013) 50-53,69
- [PP6] **S. Furmaniak**, SORPCJA WODY PRZEZ PRODUKTY ŻYWNOŚCIOWE (CZ. II) *LAB Laboratoria, Aparatura, Badania* 5/2013 (2013) 18-22
- [PP7] **S. Furmaniak**, WYKORZYSTANIE SYMULACJI MONTE CARLO. MODELOWANIE ADSORPCJI CHLOROFORMU WEWNĄTRZ NANORUREK WĘGLOWYCH (CZ. I) *LAB Laboratoria, Aparatura, Badania* 5/2014 (2014) 15-18
- [PP8] **S. Furmaniak**, WYKORZYSTANIE SYMULACJI MONTE CARLO. MODELOWANIE ADSORPCJI CHLOROFORMU WEWNĄTRZ NANORUREK WĘGLOWYCH (CZ. II) *LAB Laboratoria, Aparatura, Badania* 6/2014 (2014) 17-24

Rozdziały w monografiach:

przed uzyskaniem stopnia doktora:

- [PM1] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, G. Rychlicki, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, M. Wiśniewski, P. Kowalczyk, MECHANISMS OF WATER ADSORPTION ON CARBONS [in:] *Water Encyclopedia, Volume: Oceanography; Meteorology; Physics and Chemistry; Water Law; and Water History Art and Culture*, Willey, USA (2005) pp. 400-404

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: sporządzenie części manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PM2] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, L. Czepirski, E. Komorowska-Czepirska, J. Szymońska, P.A. Gauden, WATER SORPTION ON FOODSTUFFS – ALTERNATIVE MODELS [in:] V.N. Pletney (ed.), *Focus on Food Engineering Research and Developments*, Nova Science Publishers, New York (2007) pp. 497-515

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; opracowanie formalizmu matematycznego; opis wszystkich danych za pomocą modeli teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 50 %.

- [PM3] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, P. Kowalczyk, G.L. Aranovich, M.D. Donohue, M. Ćwiertnia, **S. Furmaniak**, G. Rychlicki, GILES' CLASSIFICATION OF SOLUTE ADSORPTION ISOTHERMS FOR BINARY NON-ELECTROLYTE SOLUTIONS VIA LATTICE DFT SUPPORTED BY EXPERIMENTAL SORPTION DATA FROM AQUEOUS SOLUTIONS ON CARBONACEOUS MATERIALS [in:] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P. Kowalczyk (eds), *Carbon Materials – Theory and Practice*, Research Signpost, Kerala, India (2008) pp. 517-570

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w weryfikacji i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 5 %.

- [PM4] M.R. Bałys, L. Czepirski, **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, SUPERCRITICAL METHANE ADSORPTION – A TOOL FOR CHARACTERIZATION OF CARBONACEOUS ADSORBENTS [in:] S. Kaskel, P. Llewellyn, F. Rodriguez-Reinoso, N.A. Seaton (eds), *Characterisation of Porous Solids: Proceedings of the 8th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids*, Royal Society of Chemistry (2009) pp. 240-247

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: wykonanie wszystkich symulacji MC; wykonanie części pozostałych obliczeń; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PM5] R.P. Wesołowski, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, CARBON NANOTUBE MEMBRANES [in:] B.B. Saha, K.C. Ng (eds), *Advances in Adsorption Technology*, Nova Science Publishers, New York (2010) ch. 7

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w opracowaniu części materiału.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PM6] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, METHANE STORAGE IN MICROPOROUS CARBONS – EFFECT OF POROSITY AND SURFACE CHEMICAL COMPOSITION TESTED ON REALISTIC CARBON MODEL [in:] B.B. Saha, K.C. Ng (eds), *Advances in Adsorption Technology*, Nova Science Publishers, New York (2010) ch. 14

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w sformułowaniu problemu naukowego; wygenerowanie serii utlenionych WWP; charakteryzację wszystkich WWP; wykonanie wszystkich symulacji MC; opis wszystkich danych za pomocą modeli

teoretycznych; współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 40 %.

po uzyskaniu stopnia doktora:

- [PM7] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, R.P. Wesołowski, P. Kowalczyk, VIRTUAL POROUS CARBON (VPC) MODELS: APPLICATION IN THE STUDY OF FUNDAMENTAL ACTIVATED CARBON PROPERTIES BY MOLECULAR SIMULATIONS [in:] J.F. Kwiatkowski (ed.), *Activated Carbon: Classifications, Properties and Applications*, Nova Science Publishers, New York, (2011) ch. 8

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: opracowanie części materiałów i wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PM8] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, P.J.F. Harris, P. Kowalczyk, VIRTUAL POROUS CARBONS [in:] J.M.D. Tascón (ed.), *Novel Carbon Adsorbents*, Elsevier, Amsterdam (2012) pp. 61-104

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: opracowanie części materiałów i wyników; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.

Mój udział procentowy szacuję na 25 %.

- [PM9] **S. Furmaniak**, WYKORZYSTANIE SYMULACJI KOMPUTEROWYCH METODAMI MONTE CARLO DO MODELOWANIA ADSORPCJI I ROZDZIAŁU MIESZANIN GAZÓW W PORACH MATERIAŁÓW WĘGLOWYCH [w:] J.K. Garbacz (red.), *Diagnozowanie Stanu Środowiska. Metody Badawcze – Prognozy*, Prace Komisji Ekologii i Ochrony Środowiska Bydgoskiego Towarzystwa Naukowego, tom VIII, BTN, Bydgoszcz (2014) str. 67-74

- [PM10] **S. Furmaniak**, WYKORZYSTANIE SYMULACJI MONTE CARLO DO MODELOWANIA ADSORPCJI I ROZDZIAŁU MIESZANINY CH₄/N₂ W PORACH WĘGLI AKTYWNYCH [w:] J.K. Garbacz (red.) *Diagnozowanie Stanu Środowiska. Metody Badawcze – Prognozy*, Prace Komisji Ekologii i Ochrony Środowiska Bydgoskiego Towarzystwa Naukowego, tom IX, BTN, Bydgoszcz (2015) str. 69-80

- [PM11] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmانيak**, K. Werengowska-Ciećwierz, P. Kowalczyk, M. Wiśniewski, CARBON NANOHORNS [in:] K.D. Sattler (ed.), *Carbon Nanomaterials Sourcebook: Nanoparticles, Nanocapsules, Nanofibers, Nanoporous Structures, and Nanocomposites, Vol. II*, CRC Press, London (2016) ch. 4

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: opracowanie części materiału; współudział w napisaniu oraz edycji manuskryptu.;

Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

- [PM12] P. Kowalczyk, D. Parsons, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmانيak**, CUBIC CARBON POLYMORPHS [in:] K.D. Sattler (ed.), *Carbon Nanomaterials Sourcebook: Nanoparticles, Nanocapsules, Nanofibers, Nanoporous Structures, and Nanocomposites, Vol. II*, CRC Press, London (2016) ch. 6

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował: współudział w wizualizacji danych oraz wyników; współudział w analizie i interpretacji wyników.

Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

- [PM13] **S. Furmانيak**, MODELOWANIE ADSORPCJI DISIARCZKU WĘGLA Z WYKORZYSTANIEM SYMULACJI MONTE CARLO ORAZ REALISTYCZNYCH MODELI BUDOWY WĘGLA AKTYWNEGO [w:] J.K. Garbacz (red.) *Diagnozowanie Stanu Środowiska. Metody Badawcze – Prognozy*, Prace Komisji Ekologii i Ochrony Środowiska Bydgoskiego Towarzystwa Naukowego, tom X, BTN, Bydgoszcz (2016) str. 13-28

5b) Udział w projektach badawczych

(i) 2008-2010

N N204 009934 (projekt badawczy promotorski)

Opis adsorpcji na nanorurkach węglowych – podejście analityczne i symulacje komputerowe
40 000 PLN

wykonawca

(ii) 2013-2015

IP2012 034872 (Iuventus Plus)

Wykorzystanie symulacji komputerowych do modelowania, przewidywania i optymalizacji adsorpcji mieszanin gazów na materiałach węglowych

35 000 PLN

kierownik

(iii) 2015-2018

2014/15/D/ST4/03760 (Sonata 8)

Wpływ porowatości i natury chemicznej powierzchni węgla na równowagi reakcji chemicznych – systematyczne badania z wykorzystaniem symulacji Monte Carlo

80 500 PLN

kierownik

5c) Nagrody i wyróżnienia za działalność naukową

2008 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (I stopnia)

2009 Stypendium dla młodych naukowców w ramach programu START Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej

2009 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (I stopnia)

2010 Stypendium dla młodych naukowców w ramach programu START Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej

2010 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (I stopnia)

2011 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (I stopnia)

2012 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (I stopnia)

2013 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (I stopnia)

2014 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (II stopnia)

2015 Nagroda zespołowa J.M. Rektora UMK za działalność naukową (III stopnia)

5d) Czynny udział w konferencjach naukowych

I SYMPOZJUM INŻYNIERII ŻYWNOŚCI – WARSZAWA 5-6 VI 2008

[K1] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, L. Czepirski, E. Komorowska-Czepirska, J. Szymońska, P.A. Gauden, R. Gołembiewski, SORPCJA WODY PRZEZ PRODUKTY ŻYWNOŚCIOWE – POSZUKIWANIE NAJBARDZIEJ UNIWERSALNEGO MODELU (k)²

WĘGIEL AKTYWNY W OCHRONIE ŚRODOWISKA I PRZEMYSŁE, VI KRAJOWA
KONFERENCJA NAUKOWO – TECHNICZNA – KAZIMIERZ DOLNY 23-25 VI 2008

[K2] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, G. Rychlicki, **S. Furmaniak**, K. Zarębska, A. Dudzińska, R. Gołembiewski, BADANIA POROWATOŚCI MATERIAŁÓW WĘGLOWYCH MODYFIKOWANYCH NA DRODZE CHEMICZNEJ (kw)

² k – komunikat ustny, kw – komunikat ustny wygłoszony przez współautora, p – poster

- [K3] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.A. Gauden, TEORIA OBJĘTOŚCIOWEGO ZAPEŁNIANIA MIKROPORÓW – WERYFIKACJA METODAMI SYMULACJI KOMPUTEROWYCH (kw)
- [K4] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, WYZNACZANIE FUNKCJI ROZKŁADU ODLEGŁOŚCI MIĘDZYRURKOWYCH – SYMULACJE GCMC ADSORPCJI AZOTU W PRZESTRZENIACH MIĘDZY NANORURKAMI WĘGLOWYMI (k)
- [K5] P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, POZORNOŚĆ A REALNOŚĆ POLA POWIERZCHNI MATERIAŁÓW WĘGLOWYCH OTRZYMANYCH Z MODELU BET (kw)
- [K6] P.A. Gauden, **A.P. Terzyk**, S. Furmaniak, MODELE BUDOWY WĘGLA AKTYWNEGO I MOŻLIWOŚĆ ICH WYKORZYSTANIA W BADANIU ZJAWISK POWIERZCHNIOWYCH (kw)
- [K7] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, G.S. Szymański, M. Motak, G. Rychlicki, WPŁYW CHEMIZMU POWIERZCHNI WĘGLA NA ADSORPCJĘ SO_2 (k)

ISSHAC-7 SURFACE HETEROGENEITY EFFECTS IN ADSORPTION AND CATALYSIS ON SOLIDS – KAZIMIERZ DOLNY 5-11 VII 2009

- [K8] A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, R.P. Wesołowski, P.J.F. Harris, VIRTUAL POROUS CARBON MODEL – MOLECULAR SIMULATIONS OF ADSORPTION FROM GASEOUS PHASE AND FROM AQUEOUS SOLUTIONS (kw)
- [K9] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, P.J.F. Harris, P. Kowalczyk, DETERMINATION OF THE SURFACE AREA OF THE CARBONACEOUS ADSORBENTS FROM THE ANALYSIS OF ADSORPTION DATA OF NOBLE GASES (kw)
- [K10] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, R.P. Wesołowski, THE INFLUENCE OF HETEROGENEITY ON ADSORPTION OF Ar, CCl_4 AND C_6H_6 ON THE BUNDLES OF MULTI-WALLED CARBON NANOTUBES (p)

WĘGIEL AKTYWNY W OCHRONIE ŚRODOWISKA I PRZEMYSŁE, VI KRAJOWA KONFERENCJA NAUKOWO – TECHNICZNA – BIAŁOWIEŻA 9-11 X 2013

- [K11] A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, K. Kaneko, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, T. Itoh, NANOROGI WĘGLOWE – MODELOWANIE I WŁAŚCIWOŚCI (kw)

- [K12] P.A. Gauden, A.P. Terzyk, **S. Furmaniak**, M. Wiśniewski, A. Bielicka, K. Werengowska-Ciećwierz, W. Zieliński, B. Kruszka, A. Bieniek, MODELOWANIE ADSORPCJI ZWIĄZKÓW BIOLOGICZNIE CZYNNYCH NA MATERIAŁACH WĘGLOWYCH (kw)
- [K13] **S. Furmaniak**, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, P. Kowalczyk, P.J.F. Harris, SYNERGICZNY WPŁYW WYMIARU NANOPORÓW WĘGLA AKTYWNEGO ORAZ UTLENIE NIA JEGO POWIERZCHNI NA ADSORPCJĘ CO₂ Z MIESZANIN CH₄/CO₂ (k)
- [K14] A. Bielicka, M. Wiśniewski, A.P. Terzyk, P.A. Gauden, **S. Furmaniak**, P. Kowalczyk, MATERIAŁY WĘGLOWE JAKO NOŚNIKI LEKÓW – WYKORZYSTANIE NOWATORSKIEJ METODY HMD (HOT-MELT-DEPOSITION) W SYNTEZIE UKŁADÓW KONTROLOWANEGO UWALNIANIA PARACETAMOLU (kw)
- XXI OGÓLNOPOLSKIE SYMPOZJUM NAUKOWE „KOMPLEKSOWE BADANIA I OCHRONA ŚRODOWISKA NATURALNEGO” – TLEŃ 16-17 VI 2014
- [K15] **S. Furmaniak**, WYKORZYSTANIE SYMULACJI KOMPUTEROWYCH METODAMI MONTE CARLO DO MODELOWANIA ADSORPCJI I ROZDZIAŁU MIESZANIN GAZÓW W PORACH MATERIAŁÓW WĘGLOWYCH (k)
- XIV POLISH-UKRAINIAN SYMPOSIUM, THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDIES OF INTERFACIAL PHENOMENA AND THEIR TECHNOLOGICAL APPLICATIONS – ZAKOPANE 9-13 IX 2014
- [K16] **S. Furmaniak**, SYSTEMATIC MONTE CARLO STUDIES ON CO₂/N₂ ADSORPTION AND SEPARATION ON REALISTIC MODELS OF ACTIVATED CARBON (p)
- [K17] P.A. Gauden, W. Zieliński, A.P. Terzyk, J. Włoch, **S. Furmaniak**, CARBON NANOTUBE BUNDLES AS NEW NANOVEHICLES IN HOT-MELT DRUG DEPOSITION OF PARACETAMOL – MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS (p)
- [K18] P.A. Gauden, W. Zieliński, A.P. Terzyk, J. Włoch, **S. Furmaniak**, THE STRUCTURE OF BENZENE ADSORBED FROM AQUEOUS SOLUTION ON CLOSED SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE BUNDLES VIA MOLECULAR DYNAMICS COMPUTER SIMULATIONS (p)

XXII OGÓLNOPOLSKIE SYMPOZJUM NAUKOWE „KOMPLEKSOWE BADANIA
I OCHRONA ŚRODOWISKA NATURALNEGO” – TLEŃ 22-23 VI 2015

- [K19] **S. Furmaniak**, WYKORZYSTANIE SYMULACJI MONTE CARLO DO MODELOWANIA ADSORPCJI I ROZDZIAŁU MIESZANINY CH₄/N₂ W PORACH WĘGLI AKTYWNYCH (k)

XXIII OGÓLNOPOLSKIE SYMPOZJUM NAUKOWE „KOMPLEKSOWE BADANIA
I OCHRONA ŚRODOWISKA NATURALNEGO” – TLEŃ 20-21 VI 2016

- [K20] **S. Furmaniak**, MODELOWANIE ADSORPCJI DISIARCZKU WĘGLA Z WYKORZYSTANIEM SYMULACJI MONTE CARLO ORAZ REALISTYCZNYCH MODELI BUDOWY WĘGLA AKTYWNEGO (k)

Ponadto współautorzy prezentowali wyniki wspólnych badań (31 doniesień) w postaci komunikatów ustnych lub posterów podczas innych konferencji międzynarodowych:

- ISSHAC-5 – Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids, Gdańsk, 30 VIII - 4 IX 2004
- Carbon for Energy Storage and Environment Protection (CESEP 2005), Orlean, 2-6 X 2005
- ISSHAC-6 – Surface Heterogeneity Effects in Adsorption and Catalysis on Solids, Zakopane, 28 VIII - 2 IX 2006
- 2nd International Conference – Carbon for Energy Storage and Environment Protection (CESEP'07), Kraków, 2-6 IX 2007
- „Catalysis for Society”, XL Years of ICSC PAS, XL Annual Polish Conference on Catalysis, Kraków, 11-15 V 2008
- The 8th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids, Edinburgh, Scotland, UK, 10-13 VI 2008
- The Annual Word Conference On Carbon – Carbon 09, Biarritz, France, 14-19 VI 2009
- 10th International Conference on Fundamental of Adsorption (FAO10), Awai, Hyogo, Japan, 23-28 V 2010
- 9th International Symposium on Characterisation of Porous Solids (IX COPS 2011), Dresden, Germany, 5-8 VI 2011
- VI International Scientific and Technical Conference – Carbon Materials & Polymer Composites – Development in Preparation, Investigation, and Application, Ustroń-Jaszowiec, 7-10 XI 2011

- Carbon 2012 Satellite Workshop: Order/Disorder in Bulk Carbon Materials: Structure/Texture, Quantification, Imaging, Modeling, Structure-Property Relationships, Kraków, 15-16 VI 2012
- VII International Scientific and Technical Conference – Carbon Materials & Polymer Composites – Development In Preparation, Investigation, and Application, Ustroń-Jaszowiec, 13-16 XI 2012
- European Congress And Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT 2013), Sevilla, Spain, 8-13 IX 2013
- ISSHAC-9 – Ninth International Symposium Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids, Wrocław, 17-23 VII 2015

oraz krajowych:

- Ochrona Człowieka i Środowiska Naturalnego Przed Skażeniami, Rembertów, czerwiec 2004
- XXXVIII Kolokwium Katalityczne, Kraków, 15-18 III 2006
- XXXIX Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 14-16 III 2007
- 50 Jubileuszowy Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego oraz Stowarzyszenia Inżynierów i Techników Przemysłu Chemicznego, Toruń, 9-12 IX 2007

w których nie brałem czynnego udziału.

5e) Działalność dydaktyczna

W ramach obowiązków dydaktycznych od 2006 roku prowadziłem następujące zajęcia dla kierunków: Chemia – studia I oraz II stopnia, Materiały Współczesnej Technologii – studia I stopnia oraz Chemia i Technologia Żywności – studia I stopnia (zajęcia w porządku alfabetycznym):

- chemia polimerów (pracownia)
- modelowanie materiałów i procesów (wykład, pracownia) – **współuczestniczyłem w przygotowaniu zajęć z tego przedmiotu**
- nanomateriały i nanostruktury (wykład, pracownia)
- podstawy chemii (pracownia, ćwiczenia, seminarium)
- podstawy chemii analitycznej (pracownia)
- podstawy programowania (wykład, pracownia) – **zajęcia autorskie**
- seminarium licencjackie
- symulacje komputerowe w chemii (wykład, pracownia) – **współuczestniczyłem w przygotowaniu zajęć z tego przedmiotu**
- wstęp do chemii nanomateriałów (pracownia)

Ponadto w roku akademickim 2013/2014 pełniłem funkcję opiekuna studentów I roku studiów dziennych I stopnia na kierunku Chemia.

5f) Opieka naukowa nad studentami w toku specjalizacji

Byłem opiekunem dwojga studentów przygotowujących prace licencjackie. Aktualnie pod moim kierunkiem powstaje praca inżynierska. Recenzowałem także 2 prace magisterskie, 2 prace inżynierskie oraz 5 prac licencjackich. Ponadto decyzją Rady Wydziału Chemii UMK z dnia 24.09.2014 r. zostałem powołany na promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim mgra Wojciecha Zielińskiego.

5g) Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych

W poniższej tabeli zestawilem informacje na temat recenzowanych przeze mnie prac w czasopismach międzynarodowych i krajowych:

<i>Lp.</i>	<i>Tytuł czasopisma</i>	<i>IF₂₀₁₄</i>	<i>Wydawca</i>	<i>Liczba recenzowanych prac</i>
1	Adsorption	1.771	Springer	1
2	Arabian Journal of Chemistry	3.725	Elsevier	1
3	Carbon	6.196	Elsevier	4
4	Chemical Engineering Communications	1.104	Taylor & Francis	1
5	Chemical Engineering Journal	4.321	Elsevier	1
5	Computational Materials Science	2.131	Elsevier	1
6	Drying Technology	1.518	Taylor & Francis	2
7	Environmental Science & Technology	5.330	ACS	1
8	Inżynieria i Ochrona Środowiska	–	Wydawnictwo Politechniki Częstochowskiej	1
9	Journal of Chemical & Engineering Data	2.037	ACS	1
10	Journal of Physical Chemistry C	4.772	ACS	2
11	Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers	2.655	Elsevier	1
12	Langmuir	4.457	ACS	1
13	Mathematical Problems in Engineering	0.762	Hindawi	1
14	Nanotechnology	3.821	IOP	1
15	Physica A	1.732	Elsevier	1
16	Separation Science and Technology	1.171	Taylor & Francis	1
17	Turkish Journal of Chemistry	1.117	Tübitak	1
razem				23

5h) Opiniowanie wniosków o finansowanie projektów badawczych

W roku 2016 zostałem zaproszony do wykonania oceny jednego wniosku o finansowanie projektu badawczego złożonego do Narodowego Centrum Nauki w ramach konkursu Preludium-10.

5i) Członkostwo w towarzystwach naukowych

Jestem członkiem Polskiego Towarzystwa Węglowego.

5j) Udział w komitetach organizacyjnych konferencji naukowych

Dwukrotnie współuczestniczyłem w organizacji International Nanoporous Carbon Meeting (INCM), który odbywał się w Toruniu (INCM-1: 03.06.2011 r., INCM-2: 07.06.2013 r.).

Byłem członkiem komitetu organizacyjnego krajowej konferencji naukowej „NanoBioMateriały – teoria i praktyka” odbywającej się w Toruniu w dniach 02-03.06.2016 r.

5k) Staże w zagranicznych lub krajowych ośrodkach naukowych lub akademickich

Nie odbywałem staży w zagranicznych lub krajowych ośrodkach naukowych lub akademickich.

5l) Syntetyczne dane dotyczące dorobku naukowego

W poniższej tabeli podsumowałem informacje na temat liczby moich prac naukowych (zestawionych w pkt. 4b oraz 5a) opublikowanych w poszczególnych okresach działalności:

		<i>przed uzyskaniem stopnia doktora</i>	<i>po uzyskaniu stopnia doktora¹⁾</i>	<i>w omawianym cyklu</i>	<i>razem</i>
1	artykuły w czasopiśmie z części A Wykazu Czasopism Naukowych M.N. i S.W.	34	43	17	77
2	artykuły w czasopiśmie z części B Wykazu Czasopism Naukowych M.N. i S.W.	2	6	1	8
3	pozostałe artykuły naukowe	4	4	–	8
4	rozdziały w monografiach	6	7	–	13
4a	- w języku angielskim	6	4	–	10
4b	- w języku polskim	–	3	–	3

¹⁾ wraz z publikacjami wchodzącymi w skład osiągnięcia wymienionego w pkt 4

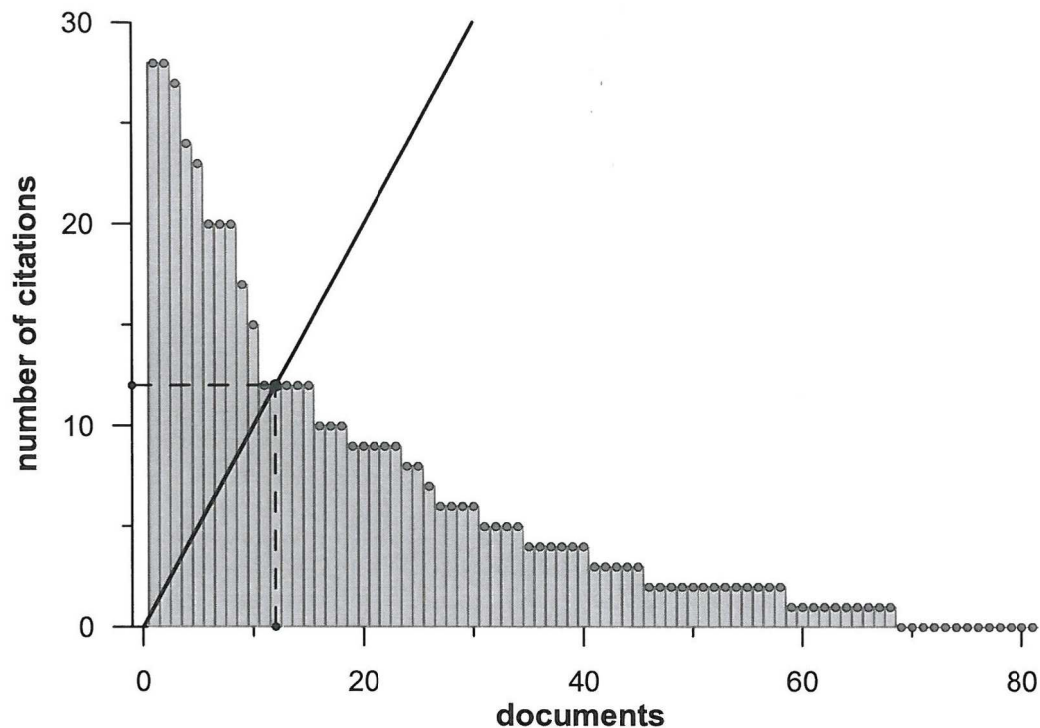
Kolejna tabela zawiera dane szczegółowe na temat moich prac opublikowanych w czasopismach z części A Wykazu Czasopism Naukowych M.N. i S.W. (czasopismach naukowe posiadających współczynnik wpływu impact factor (IF), znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JCR)):

<i>Czasopismo</i>	<i>IF₂₀₁₄</i>	<i>Liczba prac</i>			
		<i>przed uzyskaniem stopnia doktora</i>	<i>po uzyskaniu stopnia doktora¹⁾</i>	<i>w omawianym cyklu</i>	<i>razem</i>
Adsorption	1.771	2	4	–	6
Adsorption Science and Technology	0.669	1	–	–	1
Advances in Colloid and Interface Science	7.776	1	–	–	1
Advances in Condensed Matter Physics	0.862	–	1	–	1
Applied Surface Science	2.711	1	–	–	1
Bulgarian Chemical Communications	0.201	–	1	–	1
Carbon	6.196	2	–	–	2
Chemical Physics Letters	1.897	1	5	3	6
Condensed Matter Physics	0.748	–	1	–	1
Drying Technology	1.518	–	1	–	1
Environmental Technology	1.560	–	1	1	1
Food Research International	2.818	1	–	–	1
Journal of Chemical Theory and Computation	5.498	1	–	–	1
Journal of Colloid and Interface Science	3.368	6	5	2	11
Journal of Food Engineering	2.771	2	–	–	2
Journal of Physical Chemistry C	4.772	2	8	3	10
Journal of Physical Chemistry Letters	7.458	–	1	–	1
Journal of Physics: Condensed Matter	2.346	5	6	4	11
Langmuir	4.457	1	–	–	1
Microporous and Mesoporous Materials	3.453	1	1	1	2
Physical Chemistry Chemical Physics	4.493	7	7	3	14
Transport in Porous Media	1.431	–	1	–	1
Σ liczba prac		34	43	17	77
Σ IF		123.688	134.343	54.619	258.031
IF/publikację		3.638	3.124	3.213	3.351

¹⁾ wraz z publikacjami wchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt 4

Informacja na temat cytowań moich prac (na podstawie bazy Scopus – stan na 26.07.2016):

- liczba prac w bazie: 81
- całkowita liczba cytowań (bez autocytacji): 499
- indeks Hirscha, h-index (bez autocytacji): 12



S. Furmianiak