

## WNIOSEK

### o przyznanie środków finansowych na działalność statutową na rok 2012

#### A. DANE WNIOSKODAWCY

1. Nazwa i adres jednostki naukowej: **Instytut Chemii Fizycznej PAN, ul. M. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa, mazowieckie**
2. Kierownik jednostki naukowej: **prof. dr hab. Robert Hołyst, Dyrektor**
3. Kategoria jednostki naukowej: **A**
4. Dane kontaktowe: **tel.: (22) 343-31-09, fax: (22) 343-33-33, (22) 632-52-76, e-mail: ichf@ichf.edu.pl, WWW: www.ichf.edu.pl**
5. NIP: **5250008755**, REGON: **000326049**
6. Nazwa banku, nr rachunku: **BPH S.A. 58 1060 0076 0000 3210 0019 3724**

#### B. DOTACJA NA UTRZYMANIE POTENCJAŁU BADAWCZEGO

I. Czy jednostka ubiega się o przyznanie dotacji bazowej: **TAK**

1. Liczba osób, w przeliczeniu na pełny wymiar czasu pracy, zatrudnionych w jednostce naukowej przy prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych na podstawie stosunku pracy, dla których jednostka ta jest podstawowym miejscem pracy:

1) w przypadku uczelni – będących pracownikami, o których mowa w art. 108 pkt 1 i 3 ustawy z dnia 27 lipca 2005 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym (Dz. U. Nr 164, poz. 1365, z późn. zm.<sup>1)</sup>) oraz pracownikami naukowo-technicznymi i inżynierjno-technicznymi, zatrudnionymi w celu wykonywania prac pomocniczych w badaniach naukowych oraz prac usługowo-badawczych;

2) w przypadku jednostek naukowych Polskiej Akademii Nauk – będących pracownikami, o których mowa w art. 87 pkt 1, 2 i 4 ustawy z dnia 30 kwietnia 2010 r. o Polskiej Akademii Nauk (Dz. U. Nr 96, poz. 619);

3) w przypadku instytutów badawczych – będących pracownikami, o których mowa w art. 39 ust. 1 pkt 1 – 3 ustawy z dnia 30 kwietnia 2010 r. o instytutach badawczych (Dz. U. Nr 96, poz. 618);

4) w przypadku pozostałych jednostek naukowych – będących pracownikami zatrudnionymi na stanowiskach związanych z prowadzeniem badań naukowych lub prac rozwojowych.

*(Uwaga: Podstawowe miejsce pracy ustala się na podstawie corocznie składanego pracodawcy pisemnego oświadczenia pracownika. Pracownik może wskazać podstawowe miejsce pracy tylko w jednej jednostce, bez względu na liczbę jednostek naukowych, w których jest zatrudniony. Zatrudnienie podaje się na dzień złożenia wniosku.)*

<sup>1)</sup> Zmiany wymienionej ustawy zostały ogłoszone w Dz. U. z 2006 r. Nr 46, poz. 328, Nr 104, poz. 708 i 711, Nr 144, poz. 1043 i Nr 227, poz. 1658, z 2007 r. Nr 80, poz. 542, Nr 120, poz. 818, Nr 176, poz. 1238 i 1240 i Nr 180, poz. 1280, z 2008 r. Nr 70, poz. 416, z 2009 r. Nr 68, poz. 584, Nr 157, poz. 1241, Nr 161, poz. 1278 i Nr 202, poz. 1553 oraz z 2010 r. Nr 57, poz. 359, Nr 75, poz. 471, Nr 96, poz. 620 i Nr 127, poz. 857 i Nr 182, poz. 1228 oraz z 2011 r. Nr 45, poz. 235 i Nr 84, poz. 455.

Ogółem **157,00**,  
w tym w każdej z grup dziedzin nauki i sztuki:

2) Nauki chemiczne	115,00
5) Nauki fizyczne	27,00
16) Nauki techniczne	15,00

*(Uwaga: Należy podać liczbę pracowników w każdej z dziedzin nauki i sztuki, zgodnie z komunikatem ogłaszanym w Biuletynie Informacji Publicznej na stronie podmiotowej Ministra. Suma podanych liczb nie może być wyższa niż podana liczba ogółem.)*

2. Wykaz planowanych do realizacji zadań badawczych, ujętych w planie zadaniowym jednostki, w tym:

1) kontynuowanych:

1) Kontynuowanych w 2012 roku (z **zaznaczeniem zadań zamkniętych z końcem 2011 -- w ich miejsce uruchomimy nowe tematy w 2012 roku**);

1. Reakcje i procesy fizykochemiczne indukowane ciśnieniem
2. Warstwy molekularne
3. Krystalochemia związków inkluzyjnych
4. **Zadanie badawcze zamknięte z dniem 31 grudnia 2011 --** Tranzycjometria procesów w stanach ekstremalnych
5. Zachowania fazowe i dynamika w roztworach polimerów
6. NMR ciała stałego – dynamika molekularna i dynamika wiązania wodorowego
7. Termodynamika dla ekologii – procesy regulacyjne
8. Struktura a selektywność inkluzyjnych kompleksów supramolekularnych
9. Kompleksy koordynacyjne i materiały funkcjonalne
10. Fizykochemia miękkiej materii
11. Techniki mikroprzepływowe i samoorganizacja w płynach złożonych
12. Synteza nanocząstek, tworzenie i charakteryzacja nanostruktur
13. Fizykochemia układów złożonych
14. Badanie zjawisk nieliniowej dynamiki chemicznej.
15. Struktura a właściwości katalityczne silnie zdyspergowanych metali na nośniku.
16. Struktura nanokryształów i jej dynamika wyzwalana reakcją chemiczną na powierzchni

17. **Zadanie badawcze zamknięte z dniem 31 grudnia 2011** -- Modelowanie w zakresie fizykochemii aerozoli
18. Wodór elektrolityczny w procesach korozji oraz jego wytwarzanie i magazynowanie jako nośnika energii
19. Charakterystyka procesów fizykochemicznych zachodzących w obszarze kilku warstw atomowych przy powierzchni ciał stałych
20. **Zadanie badawcze zamknięte z dniem 31 grudnia 2011:** Wysokorozdzielcza (SAM, AES, SEM) i elektrochemiczna charakterystyka materiałów funkcjonalnych i konstrukcyjnych
21. Badanie oddziaływań międzycząsteczkowych metodami spektroskopowymi i mikroskopią STM/AFM
22. Rozwój teorii cieczy w zastosowaniu do predykcji równowag fazowych i tworzenia baz danych rekomendowanych
23. Elektrody modyfikowane o potencjalnym zastosowaniu w czujnikach i ogniwach
24. Zjawiska złożone, procesy nierównowagowe i przetwarzanie informacji przy wykorzystaniu reakcji chemicznych.
25. Astrochemia laboratoryjna: Fotochemia, astrochemia oraz spektroskopia oscylacyjna i elektronowa cząsteczek z rodziny cyjanoacetylenów
26. Fotelektronika Organiczna: Jedno- i wielordzeniowe kompleksy lantanowców jako emitery dla diagnostyki biomedycznej
27. Ultraszybkie techniki laserowe: metody wytwarzania impulsów o dużych mocach szczytowych; pomiary kinetyczne o wysokiej czasowej zdolności rozdzielczej
28. Fotoindukowane procesy przenoszenia ładunku: badania procesów przenoszenia elektronu i fototautomeryzacji w fazach skondensowanych i w warunkach izolacji w naddźwiękowych wiązkach molekularnych
29. Fotofizyka i spektroskopia układów fotoaktywnych: struktura i reaktywność układów z wiązaniami wodorowymi
30. Konwersja energii w procesach przeniesienia ładunku

2) nowych:

- 1. Nanoinżynieria powierzchni do chemo- i biocujników (w miejsce zamkniętego zadania 4)**
- 2. Chemia środowiska (w miejsce zadania 17)**
- 3. B+R zielona chemia (w miejsce zadania 20)**

3. Informacja o terminie przeprowadzonego audytu zewnętrznego, o którym mowa w art. 34 ust. 1 pkt 1 ustawy z dnia 30 kwietnia 2010 r. o zasadach finansowania nauki (Dz. U. Nr 96, poz. 615 oraz 2011 r. Nr 84, poz. 445): **2011-06-30**

II. Czy jednostka ubiega się o przyznanie dotacji na finansowanie kosztów związanych z restrukturyzacją: NIE

### **C. DOTACJA NA FINANSOWANIE KOSZTÓW ZWIĄZANYCH Z UTRZYMANIEM SPECJALNEGO URZĄDZENIA BADAWCZEGO**

Czy jednostka ubiega się o przyznanie środków na finansowanie kosztów związanych z utrzymaniem specjalnego urządzenia badawczego: NIE

### **D. DOTACJA NA FINANSOWANIE DZIAŁALNOŚCI POLEGAJĄCEJ NA PROWADZENIU BADAŃ NAUKOWYCH LUB PRAC ROZWOJOWYCH ORAZ ZADAŃ Z NIMI ZWIĄZANYCH, SŁUŻĄCYCH ROZWOJOWI MŁODYCH NAUKOWCÓW ORAZ UCZESTNIKÓW STUDIÓW DOKTORANCKICH**

Czy jednostka ubiega się o przyznanie środków na działalność polegającą na prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych oraz zadań z nimi związanych, służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich: TAK

1. Wykaz planowanych do realizacji zadań badawczych (w tym tytuł rozprawy doktorskiej), ujętych w planie zadaniowym jednostki, w tym związanych z:

- 1) rozwojem naukowym młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich;

#### **Wykaz planowanych do realizacji zadań badawczych wraz z tytułami rozpraw doktorskich**

1	<p><b>Reakcje i procesy fizykochemiczne indukowane ciśnieniem</b></p> <p>Tytuł rozprawy doktorskiej:</p> <p>„Wysokociśnieniowe badania rentgenowskie i rozpraszania Ramana wybranych związków o wysokiej zawartości wodoru”</p>
2	<p><b>Warstwy molekularne</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Polimery wdrukowywane molekularnie jako warstwy rozpoznające w chemosensorach selektywnych względem wybranych substancji o znaczeniu biologicznym”</p> <p>„Cienkie warstwy ustrukturowanej porfiryny kobaltu lub cynku i fulerenu C<sub>60</sub> do przetwarzania energii słonecznej, elektrokatalizy i rozpoznawania molekularnego”</p>

3	<p><b>Kryształochemia związków inkluzyjnych</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Supramolekularna samoorganizacja kaliksarenów i ich kompleksów w ciele stałym: badania strukturalne”</p> <p>„Samoorganizacja wybranych amfifilowych kaliks[4]arenów i kaliks[6]arenów w ciele stałym - badania metodą dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na monokryształach”</p>
4	<p><b>Nanoinżynieria powierzchni do chemo- i bioczuJNIKÓW</b></p>
5	<p><b>Zachowania fazowe i dynamika w roztworach polimerów</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Zachowania fazowe i dynamika w roztworach polimerów dendrytycznych”</p> <p>„Zachowania fazowe i dynamika w roztworach polimerów i cieczy jonowych”</p>
6	<p><b>NMR ciała stałego – dynamika molekularna i dynamika wiązania wodorowego</b></p>
7	<p><b>Termodynamika dla ekologii – procesy regulacyjne</b></p> <p>Tytuł rozprawy doktorskiej:</p> <p>„Badania własności fizykochemicznych kompleksów pochodnych efedryny i chininy z cyklodekstrynami (<math>\alpha</math>-,<math>\beta</math>-,<math>\gamma</math>-) naniesionych na nanocząsteczkowy węglan wapnia”</p>
8	<p><b>Struktura a selektywność inkluzyjnych kompleksów supramolekularnych</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Generowanie układów enancjoselektywnych z wykorzystaniem oligo- i polisacharydów”</p> <p>„Badanie aktywacji tlenu molekularnego przez związki alkilowe metali grup głównych”</p> <p>„Projektowanie, synteza, badania budowy organocynkowych prekursorów materiałów porowatych i nanocząstek tlenku cynku”</p> <p>„Kompleksy kaskadowe w chromatografii i elektroforezie”</p> <p>„Potrójne kompleksy cyklodekstryn w chromatografii gazowej – struktura a selektywność</p> <p>„Właściwości inkluzyjne cyklodekstryn w cieczach jonowych”</p>
9	<p><b>Kompleksy koordynacyjne i materiały funkcjonalne</b></p> <p>Tytuł rozprawy doktorskiej:</p> <p>„Materiały funkcjonalne z prekursorów cynkoorganicznych: otrzymywanie i badanie własności”</p>

10	<p><b>Fizykochemia miękkiej materii</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Otrzymywanie powierzchni wzmacniających sygnały ramanowskie”</p> <p>„Monowarstwy Langmuira ferroelektrycznych i bolaamfifilowych ciekłych kryształów na granicy faz woda-powietrze”</p>
11	<p><b>Techniki mikroprzepływowe i samoorganizacja w płynach złożonych</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Zastosowanie technologii mikroprzepływów w bioanalityce”</p> <p>„Mikroprzepływowe techniki tworzenia pian i emulsji”</p> <p>„Zastosowanie technologii mikroprzepływów w mikrobiologii środowiskowej”</p> <p>„Dynamiczna kontrola oddziaływań elektrostatycznych w układach miękkiej materii poprzez stosowanie zewnętrznych pól elektrycznych”</p>
12	<p><b>Synteza nanocząstek, tworzenie i charakteryzacja nanostruktur</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Funkcjonalizowanie powierzchni metalicznych”</p> <p>„Nanocząstki w płynach złożonych”</p>
13	<p><b>Fizykochemia układów złożonych</b></p>
14	<p><b>Badanie zjawisk nieliniowej dynamiki chemicznej</b></p>
15	<p><b>Struktura a właściwości katalityczne silnie zdyspergowanych metali na nośniku</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Charakteryzacja i aktywność katalityczna w reakcjach elektrotleniania kwasu mrówkowego”</p> <p>„Synteza nanostrukturalnych metalicznych katalizatorów: ich charakterystyka i zastosowanie w fotokatalitycznym oczyszczaniu wody i powietrza”</p>
16	<p><b>Struktura nanokryształów i jej dynamika wyzwalana reakcją chemiczną na powierzchni</b></p>
17	<p><b>Chemia środowiska</b></p> <p>Tytuł rozprawy doktorskiej:</p> <p>„Kinetyka chemiczna wybranych reakcji biogenicznych związków organicznych o istotnym znaczeniu dla środowiska”</p>
18	<p><b>Wodór elektrolityczny w procesach korozji oraz jego wytwarzanie i magazynowanie, jako nośnika energii</b></p>

19	<b>Charakterystyka procesów fizykochemicznych zachodzących w obszarze kilku warstw atomowych przy powierzchni ciał stałych</b>
20	<b>B+R zielona chemia</b>
21	<p><b>Badanie oddziaływań międzycząsteczkowych metodami spektroskopowymi i mikroskopią STM/AFM</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Badanie samoorganizacji oligomerów wybranych alkilowych pochodnych tiofenu na powierzchni monokryształu grafitu metodą skaningowej mikroskopii tunelowej”</p> <p>„Korelacja zjawisk powierzchniowych i objętościowych w procesie tworzenia wodorków niektórych metali ziem rzadkich”</p>
22	<p><b>Rozwój teorii cieczy w zastosowaniu do predykcji równowag fazowych i tworzenia baz danych rekomendowanych</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Opracowanie modelu termodynamicznego, uwzględniającego asocjację, do predykcji krzywych rozpuszczalności w układach woda+ester”</p> <p>„Opracowanie fizykochemicznego modelu wodnych roztworów chlorowcopochodnych węglowodorów dla ilościowego przewidywania wzajemnej rozpuszczalności w szerokim zakresie temperatury”</p>
23	<p><b>Elektrody modyfikowane o potencjalnym zastosowaniu w czujnikach i ogniwach</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Reakcje elektrochemiczne na granicy trzech faz: elektroda/ciecz jonowa/wodny elektrolit”</p> <p>„Elektrody modyfikowane nanocząstkami”</p> <p>„Wykrywanie wirusów z wykorzystaniem zjawiska rezonansu plazmonów powierzchniowych”</p> <p>„Elektrody modyfikowane nanocząstkami i enzymami”</p>
24	<p><b>Zjawiska złożone, procesy nierównowagowe i przetwarzanie informacji przy wykorzystaniu reakcji chemicznych</b></p> <p>Tytuł rozprawy doktorskiej:</p> <p>„Zastosowanie pobudliwych układów chemicznych do przetwarzania informacji”</p>
25	<p><b>Astrochemia laboratoryjna: Fotochemia, astrochemia oraz spektroskopia oscylacyjna i elektronowa cząsteczek z rodziny cyjanoacetylenów</b></p> <p>Tytuł rozprawy doktorskiej:</p> <p>„Niskotemperaturowe badania fotochemii i spektroskopii cyjanoacetylenów o znaczeniu astrofizycznym”</p>
26	<p><b>Fotoelektronika Organiczna: Jedno- i wielordzeniowe kompleksy lantanowców jako emiterzy dla diagnostyki biomedycznej</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Fotoindukowane przeniesienie elektronu w laktonach triarylometanowych. Zależność fotofizyki od struktury”</p> <p>„Badania fotofizyki i fotochemii wybranych spirocyklicznych układów donorowo-akceptorowych”</p>
27	<p><b>Ultraszybkie techniki laserowe: metody wytwarzania impulsów o dużych mocach szczytowych; pomiary kinetyczne o wysokiej czasowej zdolności rozdzielczej</b></p> <p>Tytuły rozpraw doktorskich:</p> <p>„Dynamika przeniesienia ładunku w cząsteczkach organicznych badana metodami optycznej spektroskopii czasowo-rozdzielczej”</p> <p>„Spektroskopia optyczna z femtosekundową zdolnością rozdzielczą”</p>

28	<b>Fotoindukowane procesy przenoszenia ładunku: badania procesów przenoszenia elektronu i fototautomeryzacji w fazach skondensowanych i w warunkach izolacji w naddźwiękowych wiązkach molekularnych</b>
29	<b>Fotofizyka i spektroskopia układów fotoaktywnych: struktura i reaktywność układów z wiązaniami wodorowymi</b> Tytuły rozpraw doktorskich: „Spektroskopia i fotofizyka w środowiskach niejednorodnych” „Struktura oscylacyjna i elektronowa cząsteczek z podwójnym wewnętrzcząsteczkowym wiązaniem wodorowym” „Mechanizmy procesów tautomeryzacji”
30	<b>Konwersja energii w procesach przeniesienia ładunku</b> Tytuł rozprawy doktorskiej: „Procesy przeniesienia elektronu zachodzące z udziałem stanów wzbudzonych MLCT”

2) rozwojem specjalności naukowych w jednostce wnioskującej, w tym określenie, w jakich specjalnościach. **Wszystkie zadania badawcze związane są z dziedziną nauk chemicznych w zakresie chemii.**

## 2. Informacja o jednostce:

1) liczba młodych naukowców zatrudnionych w jednostce nie krócej niż 3 miesiące w okresie ostatnich 2 lat poprzedzających rok złożenia wniosku:

Wyszczególnienie	Liczba młodych naukowców zatrudnionych w jednostce nie krócej niż 3 miesiące:		
	ogółem	którzy uzyskali stopień naukowy w ostatnich 2 latach poprzedzających rok złożenia wniosku:	
		w jednostce	poza jednostką
1	2	3	4
Ogółem:	<b>82</b>	<b>8</b>	<b>2</b>
W tym w każdej z grup dziedzin nauki i sztuki (zgodnie z komunikatem ogłaszanym w Biuletynie Informacji Publicznej na stronie podmiotowej Ministra):			
2) Nauki chemiczne	<b>67</b>	<b>8</b>	<b>1</b>
5) Nauki fizyczne	<b>9</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
16) Nauki techniczne	<b>6</b>	<b>0</b>	<b>0</b>

(Uwaga: Każda zatrudniona osoba może być wykazana tylko raz w okresie 2 lat.)

2) liczba uczestników studiów doktoranckich prowadzonych przez jednostkę\* w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku oraz liczba młodych naukowców, którzy mają otwarty przewód doktorski, ale nie są uczestnikami studiów doktoranckich:



Wyszczególnienie	Liczba uczestników studiów doktoranckich prowadzonych przez jednostkę	Liczba młodych naukowców, którzy mają otwarty przewód doktorski, ale nie są uczestnikami studiów doktoranckich
1	2	3
Ogółem:	<b>67</b>	<b>1</b>
W tym w każdej z grup dziedzin nauki i sztuki (zgodnie z komunikatem ogłaszającym w Biuletynie Informacji Publicznej na stronie podmiotowej Ministra):		
2) Nauki chemiczne	<b>67</b>	<b>1</b>

\* Wypełnia wyłącznie jednostka uprawniona do prowadzenia studiów doktoranckich na podstawie odrębnych przepisów.

3) informacja o stopniach naukowych nadanych w jednostce młodym naukowcom w ostatnich 2 latach poprzedzających rok złożenia wniosku:

a) liczba nadanych stopni naukowych doktora:

Wyszczególnienie	Nadane stopnie naukowe:		
	ogółem (3+4)	młodym naukowcom	
		zatrudnionym w jednostce	spoza jednostki
1	2	3	4
Ogółem:	<b>10</b>	<b>8</b>	<b>2</b>
W tym w każdej z grup dziedzin nauki i sztuki (zgodnie z komunikatem ogłaszającym w Biuletynie Informacji Publicznej na stronie podmiotowej Ministra):			
2) Nauki chemiczne	<b>10</b>	<b>8</b>	<b>2</b>

b) liczba nadanych stopni naukowych doktora habilitowanego:

Wyszczególnienie	Nadane stopnie naukowe:		
	ogółem (3+4)	młodym naukowcom	
		zatrudnionym w jednostce	spoza jednostki
1	2	3	4

Ogółem:	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
W tym w każdej z grup dziedzin nauki i sztuki (zgodnie z komunikatem ogłaszającym w Biuletynie Informacji Publicznej na stronie podmiotowej Ministra):			

#### **E. DOTACJA NA DZIAŁALNOŚĆ ZWIĄZANĄ Z UTRZYMANIEM I POSZERZANIEM NAUKOWYCH BAZ DANYCH**

Czy jednostka ubiega się o przyznanie środków na działalność związaną z utrzymaniem i poszerzeniem naukowych baz danych: TAK

1. **Wnioskowana kwota dotacji 150 000,00 zł (słownie: sto pięćdziesiąt tysięcy złotych zł).**
2. Nazwa bazy: **SCI Finder**
3. Informacje o bazie:
  - 1) tematyka bazy; - **baza abstraktowa z dziedziny chemii**
  - 2) rejestrowane dane; **abstraktuje ponad 1350 tytułów czasopism chemicznych i ponad 9000 tytułów czasopism naukowych z innych dziedzin**
  - 3) zakres chronologiczny: **od 1907 r.**
  - 4) opis zawartości bazy; **zawiera dane bibliograficzne artykułów , opisy patentów, sprawozdań, konferencji, raportów i dysertacji + moduł wyszukiwania po wzorach strukturalnych.**
  - 5) liczba jednostek wchodzących w skład konsorcjum – **16 instytucji.**
4. Cel utworzenia bazy:  
**Zapewnienie dostępu do danych faktograficzno abstraktowych z szeroko pojętej chemii dla instytucji naukowych.**
5. Zasady i warunki udostępniania bazy.  
**poprzez wszystkie komputery o numerach IP zarejestrowanych na serwerze ICHF – dostęp jednoczesny dla 6 użytkowników**
6. Informacja o finansowaniu utrzymania naukowych baz danych z innych źródeł niż dotacja.
  1. – **płatność : 78% Min. Nauki i Szk. Wyższego oraz 22% przez ICHF PAN**
7. Informacja o planowanych rodzajach kosztów wraz z uzasadnieniem ich wysokości w części finansowanej z dotacji.
  1. **150.000,00 zł. – wysokość opłaty przypadającej na ICHF PAN (przy uwzględnieniu dofinansowania)**
1. **Wnioskowana kwota dotacji 50 000,00 zł (słownie: pięćdziesiąt tysięcy złotych zł).**

2. Nazwa bazy: **American Chemical Society - ACS**

3. Informacje o bazie:

1) tematyka bazy; - **baza pełnotekstowa czasopism wydawanych przez American Chemical Society**

1) rejestrowane dane; **obejmuje 42 tytuły czasopism chemicznych**

2) zakres chronologiczny: **od 1995 r.**

4) opis zawartości bazy; **zawiera pełne teksty artykułów czasopism wydawanych przez American Chemical Society**

5) liczba jednostek wchodzących w skład konsorcjum – **41 instytucji**

4. Cel utworzenia bazy:

**zapewnienie dostępu do pełnych tekstów czasopism chemicznych dla instytucji naukowych**

5. Zasady i warunki udostępniania bazy.

**1. dostęp jednoczesny dla nieograniczonej liczby użytkowników poprzez wszystkie komputery o zakresach IP zarejestrowanych na serwerze ICHF**

6. Informacja o finansowaniu utrzymania naukowych baz danych z innych źródeł niż dotacja.  
– **płatność : 50% Min. Nauki i Szk. Wyższego oraz 50% przez ICHF PAN**

7. Informacja o planowanych rodzajach kosztów wraz z uzasadnieniem ich wysokości w części finansowanej z dotacji.

**1. 50.000,00 zł. – wysokość opłaty przypadającej na ICHF PAN (przy uwzględnieniu dofinansowania)**

**1. Wnioskowana kwota dotacji 60 000,00 zł (słownie: sześćdziesiąt tysięcy złotych zł).**

2. Nazwa bazy: **American Institute of Physics – AIP/APS + archiwa**

3. Informacje o bazie:

1) tematyka bazy; - **baza pełnotekstowa czasopism wydawanych przez American Institute of Physics i American Physical Society**

1) rejestrowane dane; **obejmuje 16 tytułów czasopism chemicznych**

2) zakres chronologiczny; **od Vol. 1 -**

3) 4) opis zawartości bazy; **zawiera pełne teksty artykułów czasopism wydawanych przez American Institute of Physics i American Physical Society**

5) liczba jednostek wchodzących w skład konsorcjum – **40 instytucji.**

4. Cel utworzenia bazy:

**zapewnienie dostępu do pełnych tekstów czasopism chemicznych dla instytucji naukowych**

5. Zasady i warunki udostępniania bazy.

**dostęp jednoczesny dla nieograniczonej liczby użytkowników poprzez wszystkie komputery o zakresach IP zarejestrowanych na serwerze ICHF.**

6. Informacja o finansowaniu utrzymania naukowych baz danych z innych źródeł niż dotacja.

**płatność : 50% Min. Nauki i Szk. Wyższego oraz 50% przez ICHF PAN**

7. Informacja o planowanych rodzajach kosztów wraz z uzasadnieniem ich wysokości w części finansowanej z dotacji.

**60.000,00 zł. – wysokość opłaty przypadającej na ICHF PAN (przy uwzględnieniu dofinansowania)**

1. **Wnioskowana kwota dotacji 40 000,00 zł (słownie: czterdzieści tysięcy złotych zł).**

2. Nazwa bazy: **Royal Society of Chemistry RSC + archiwa**

3. Informacje o bazie:

1) tematyka bazy; - **baza pełnotekstowa czasopism wydawanych przez Royal Society of Chemistry**

2) rejestrowane dane; **obejmuje 35 tytułów czasopism chemicznych + archiwa**

3) zakres chronologiczny; **od 1841 r.**

4) opis zawartości bazy; **zawiera pełne teksty artykułów czasopism wydawanych przez Royal Society of Chemistry ; możliwość przeszukiwania poprzez związki i struktury chemiczne**

5) liczba jednostek wchodzących w skład konsorcjum – **30 instytucji.**

4. Cel utworzenia bazy:

**zapewnienie dostępu do pełnych tekstów czasopism chemicznych dla instytucji naukowych**

5. Zasady i warunki udostępniania bazy.

**dostęp jednoczesny dla nieograniczonej liczby użytkowników poprzez komputery o numerach IP zarejestrowanych na serwerze ICHF.**

6. Informacja o finansowaniu utrzymania naukowych baz danych z innych źródeł niż dotacja.  
– **płatność : 47% Min. Nauki i Szk. Wyższego oraz 53% przez ICHF PAN**

7. Informacja o planowanych rodzajach kosztów wraz z uzasadnieniem ich wysokości w części finansowanej z dotacji.

**ok. 40.000,00 zł. – wysokość opłaty przypadającej na ICHF PAN (przy uwzględnieniu dofinansowania)**

1. **Wnioskowana kwota dotacji 10 000,00 zł (słownie: dziesięć tysięcy złotych zł).**

2. Nazwa bazy: **Proquest**

## 3. Informacje o bazie:

- 1) tematyka bazy; - **agregatowa baza pełnotekstowa czasopism z dyscyplin o charakterze nauk ścisłych (dla części tytułów obowiązuje karencja od 1 miesiąca do roku)**
- 2) rejestrowane dane; **obejmuje ok. 3000 tytułów czasopism z nauk ścisłych**
- 3) zakres chronologiczny; **różny dla poszczególnych tytułów** (od kilku do kilkunastu lat)
- 4) opis zawartości bazy; **zawiera pełne teksty artykułów czasopism wydawanych przez rozmaitych wydawców i towarzystwa naukowe całego świata**
- 5) liczba jednostek wchodzących w skład konsorcjum – **27 instytucji.**

## 4. Cel utworzenia bazy:

**zapewnienie dostępu do pełnych tekstów czasopism chemicznych dla instytucji naukowych. poprzez komputery o numerach IP zarejestrowanych na serwerze ICHF – dostęp jednoczesny dla nieograniczonej liczby użytkowników**

## 5. Zasady i warunki udostępniania bazy.

**dostęp jednoczesny dla nieograniczonej liczby użytkowników poprzez komputery o numerach IP zarejestrowanych na serwerze ICHF.**

## 6. Informacja o finansowaniu utrzymania naukowych baz danych z innych źródeł niż dotacja.

**płatność : 50% Min. Nauki i Szk. Wyższego oraz 50% przez ICHF PAN**

## 7. Informacja o planowanych rodzajach kosztów wraz z uzasadnieniem ich wysokości w części finansowanej z dotacji.

**10.000,00 zł. – wysokość opłaty przypadającej na ICHF PAN (przy uwzględnieniu dofinansowania)**

## 1. Wnioskowana kwota dotacji 50 000,00 zł (słownie: pięćdziesiąt tysięcy złotych zł).

2. Nazwa bazy: **HORIZON katalog Bibliotek naukowych PAN – z dostępem on-line**

## 3. Informacje o bazie:

- 1) tematyka bazy; - **baza katalogowa książek i czasopism posiadanych przez Bibliotkę ICHF**
  - 1) rejestrowane dane; **obejmuje 31778 rekordów - ICHF**
  - 2) zakres chronologiczny; **od 1995 r. - dane kompletne wprowadzane na bieżąco , od 1955 do 1994 - dane retrospektywnie wprowadzane sukcesywnie**
  - 4) opis zawartości bazy; **opisy bibliograficzne książek i czasopism posiadanych przez Bibliotkę ICHF**
  - 5) liczba jednostek wchodzących w skład konsorcjum – **24 instytucje.**

## 4. Cel utworzenia bazy:

zapewnienie dostępu do danych bibliograficznych dotyczących zbiorów posiadanych przez Biblioteki naukowe PAN

5. Zasady i warunki udostępniania bazy.  
**dostęp jednoczesny dla nieograniczonej liczby użytkowników z dowolnego komputera w Polsce posiadającego dostęp internetowy**
6. Informacja o finansowaniu utrzymania naukowych baz danych z innych źródeł niż dotacja.

**płatność : 100 % przez ICHF PAN**

7. Informacja o planowanych rodzajach kosztów wraz z uzasadnieniem ich wysokości w części finansowanej z dotacji.

**50.000,00 zł. – wysokość opłaty przypadającej na ICHF PAN (baza nie jest dofinansowana)**

**W tym 10.455,00 zł. – koszt obsługi informatycznej systemu Horizon oraz 39.545,00 zł. – koszt wynagrodzenia pracowników za retrospektywne wprowadzanie opisów bibliograficznych katalogowanych pozycji (opis katalogowy oraz wprowadzanie zasobów książek i czasopism począwszy od najwcześniejszego, posiadanego przez Bibliotekę rocznika). Koszt wprowadzania nie obejmuje bieżących zasobów, które są wprowadzane w ramach obowiązków służbowych.**

## **F. RAPORTY Z WYKORZYSTANIA ŚRODKÓW PRZYZNANYCH W ROKU POPRZEDZAJĄCYM ROK ZŁOŻENIA WNIOSKU**

### **I. RAPORT Z WYKORZYSTANIA ŚRODKÓW PRZYZNANYCH NA UTRZYMANIE POTENCJAŁU BADAWCZEGO**

Czy jednostka złożyła w terminie do 15 lipca wg dotychczasowych wzorów rozliczenie dotacji na podstawową działalność statutową w 2010 r. NIE

1. Syntetyczny opis zrealizowanych zadań badawczych objętych planem zadaniowo-finansowym z roku poprzedzającego rok złożenia wniosku, ze wskazaniem najważniejszych osiągnięć naukowych i zastosowań praktycznych oraz zadań z zakresu działalności upowszechniającej naukę.

#### **Podsumowanie IChF PAN w 2010 roku**

- A. W 2010 roku Instytut Chemii Fizycznej PAN zajął III miejsce wśród jednostek chemicznych (i I miejsce wśród dużych jednostek >100 naukowców) w kategoryzacji MNiSW.**
- B. W 2010 roku złożyliśmy wniosek w ramach programu REGPOT FP-7 na wsparcie najlepszych jednostek naukowych. Nasz grant **Noblesse** jako jeden z 7 (na 292 wnioski złożone w Brukseli) otrzymał maksymalną liczbę punktów i został zakwalifikowany do finansowania na lata 2011-2014. **Z kwotą 3,32 mln euro jest to jeden z największych grantów przyznanych pojedynczej instytucji naukowej w Polsce z Brukseli.****
- C. W 2010 roku złożyliśmy grant w programie ERC Ideas FP-7 (dla młodych uczonych), który przeszedł w 2010 roku do drugiej tury.**
- D. W 2010 roku złożyliśmy w Brukseli grant w programie ERC Ideas FP-7 (Advanced Investigators Grant).**
- E. W 2010 roku realizowaliśmy 3 granty TEAM wygrane w najbardziej prestiżowym konkursie grantowym organizowanym przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej**
- F. W 2010 roku opublikowaliśmy 215 prac w tym 175 prac z listy filadelfijskiej w tym 21 prac w prestiżowych czasopismach z IF>5 w tym 3 prace w czasopismach z IF>10.**
- G. W 2010 roku zgłosiliśmy 25 zgłoszeń patentowych w tym 2 międzynarodowe i uzyskaliśmy 1 patent za**

zgłoszenie z 2008 roku.

H. W 2010 roku **sprzedaliśmy nasze produkty za kwotę ponad 5 600 000 zł.**

I. Stworzyliśmy **nowy standard w spektroskopii elektronowej** dla National Institute of Standard and Technology (NIST USA) i dziś już 60% światowych standardów w tej dziedzinie jest autorstwa IChF PAN.

J. Współpracowaliśmy z 43-ma instytucjami naukowymi na świecie w tym z **Instytutami Maxa Plancka w Niemczech, Ecole Normale Superieure we Francji, Oxford/Cambridge w Wielkiej Brytanii.** Przedstawiliśmy wyniki naszych badań na ponad 200 wystąpieniach na konferencjach oraz seminariach w kraju i na świecie.

K. Informacje o odkryciach w Instytucie w 2010 pojawiło się na polskich serwisach internetowych 360 razy i 400 razy na serwisach anglojęzycznych i miało okazję obejrzeć 30 mln internautów. Nasze notki prasowe były tłumaczone na rosyjski, szwedzki, niemiecki, włoski i hiszpański). 11 razy gościliśmy na serwisie ScienceDaily, odwiedzanym przez 2,5 mln internatów zainteresowanych nauką. Nasz serwis prasowy (najlepszy wśród polskich instytucji naukowych) znajduje się na stronie <http://www.ichf.edu.pl/press/index.html>.

## Najważniejsze wyniki naukowe

1. (zespół prof. J.Waluka, C. Radzewicza i M.Pietraszkiewicza) Unusual, solvent viscosity-controlled tautomerism and photophysics: meso-alkylated porphycenes; Gil, M., Dobkowski, J., Wiosna-Salyga, G., Urbańska, N., Fita, P., Radzewicz, C., Pietraszkiewicz, M., Borowicz, P., Marks, D., Glasbeek, M., Waluk, J.; J. Am. Chem. Soc. 132, 13472-13485 (2010).

Wyniki stacjonarnych i czasowo-rozdzielczych eksperymentów pozwoliły zrozumieć mechanizmy dezaktywacji stanów wzbudzonych porficyenów i zależność stałych szybkości od lepkości. Uzyskane rezultaty dobrze rokują dla przyszłych badań, w których planujemy użycie porficyenów jako sond nanolepkości, również w układach biologicznych.

2. (zespoły prof. J.Lewińskiego, J.Lipkowskiego i Z.Kaszura) Solid-State Conversion of the Solvated Dimer  $[\text{tBuZn}(\text{m-OtBu})(\text{thf})_2]_2$  into a Long Overlooked Trimeric  $[\text{tBuZnOtBu}]_3$  Species J. Lewiński, M. Dutkiewicz, M. Lesiuk, W. Śliwiński, K. Zelga, I. Justyniak, J. Lipkowski, Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 8266.

Cinchona Alkaloid–Metal Complexes: Noncovalent Porous Materials with Unique Gas Separation Properties J. Lewiński, T. Kaczorowski, D. Prochowicz, T. Lipińska, I. Justyniak, Z. Kaszkur, J. Lipkowski, Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 7035.

Badania termogravimetryczne oraz PXRD pokazały, że uzyskany mikroporowaty materiał posiada tzw. permanentną porowatość, tj. zdolność do odwracalnego wprowadzania/usuwania gościa do matrycy porowatej. Badania sorpcji gazów H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> i CH<sub>4</sub> pokazały unikalne właściwości materiału. Układ ten wykazuje m. in. rekordowe wartości początkowych izosterycznych ciepł adsorpcji gazów H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> i CH<sub>4</sub>, a także tzw. efekt temperaturowego uruchamiania adsorpcji N<sub>2</sub>. Materiał ten charakteryzuje bardzo wysoka selektywność w procesach rozdziału H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> (28:1, 77 K) oraz CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> (74:1, 273 K) pod niskimi ciśnieniami.

3. (zespół prof. P. Garsteckiego) High-throughput automated droplet microfluidic system for screening of reaction conditions K. Churski, P.Korczyk, P.Garstecki Lab Chip, 10, 816-818, 2010. Skonstruowany układ mikroprzepływowy jest miniaturowym reaktorem chemicznym rozmiarów karty kredytowej. Reakcje zachodzą we wnętrzach drobnych kropli, przesuwających się wzdłuż odpowiednio zaprojektowanych kanalików. Objętości kropli są kontrolowane za pomocą komputera i zazwyczaj wynoszą ok. jednego mikrolitra. Układ mikroprzepływowy z IChF PAN może być szczególnie przydatny w badaniach mikrobiologicznych. W przeprowadzonych testach każda mikrokropla z bakteriami łączyła się z dwiema mikrokroplami antybiotyków, chlorafenikolem i tetracykliną, przy czym objętości tych ostatnich zmieniano dynamicznie, regulując w ten sposób proporcje między lekami. Po inkubacji bakterii sekwencja kropli przepływała przez układ podłączony do spektrofotometru dzięki czemu w łatwy sposób określono żywotność kolonii w poszczególnych kroplach.

## 1. Wysokie ciśnienia w badaniach materii i syntezach nowych materiałów (prof. Stanisław Filipek)

Wykonano pomyślnie szereg syntez nowych wodorków, głównie w związkach międzymetalicznych, oraz zbadano ich wybrane właściwości. Dwie prace opublikowano, cztery są przyjęte do druku, trzy wysłane do czasopism. Poniżej przedstawiam najważniejsze wyniki:

- wcześniej odkryliśmy, że w warunkach wysokiego ciśnienia wodoru fazy Lavesa  $YMn_2$  (C15) i  $RMn_2$  (R = Er, Dy, Ho, Gd) o strukturze regularnej C15 lub C14 przekształcają się w niezwykle sposób w wodorek o symetrii  $Fm-3m$ . Obecnie także  $YMn_2$  o strukturze C14 przekształcono w wodorek  $Fm-3m$ . Dla wodorków  $YMn_2H_6$  otrzymanych ze struktury C15 i C14 wyznaczono temperaturową zależność ciepła właściwego w niskich temperaturach. Możliwość otrzymania struktury  $Fm3m$  nie tylko z faz Lavesa (C14 lub C15)) ale i ze skomplikowanych związków międzymetalicznych wykryto wcześniej dla  $Y_6Mn_{23}$  a obecnie potwierdzono także dla  $Gd_6Mn_{23}$ .

- w warunkach 1 GPa( $D_2$ ) i 100<sup>0</sup>C przekształcono fazy Lavesa  $DyFe_2$  i  $HoFe_2$  w ortorombowe wodorki typu  $RFe_2D_5$  izostrukturalne z otrzymanymi wcześniej  $YFe_2H_5$  i  $ErFe_2H_5$ . Dla  $GdFe_2$  i  $TbFe_2$  w tych samych warunkach otrzymano deuterki o podobnie wysokim stężeniu ( $GdFe_2D_5$  i  $TbFe_2D_5$ ) ale o strukturze regularnej.

- dla  $ZrNi_5$  otrzymano dwie fazy wodorkowe o różnych parametrach sieciowych. W obu fazach stwierdzono szeroki zakres rozpuszczalności wodoru. W warunkach normalnych kinetyka rozkładu obydwu faz jest w początkowym okresie bardzo szybka; w ciągu kilku minut znaczna część wodoru ulega desorpcji. Przewidziane są dalsze badania tych wodorków z pomocą techniki NPD.

- otrzymano nową fazę w układzie woda-wodór w niskich temperaturach i pod wysokim ciśnieniem. Wstępne badania rentgenowskie i neutronograficzne wskazują na strukturę heksagonalną o parametrach  $a=6.334 \text{ \AA}$  i  $c=6.203 \text{ \AA}$ .

- dla stopów pseudobinarych  $Zr(Fe_xCo_{1-x})_2$ , wykazano, że ze wzrostem stężenia żelaza rośnie stabilność fazy wodorkowej oraz ilość absorbowanego wodoru. Stopy te, podobnie do wcześniej wykrytych przez nas wodorków  $ZrFe_2$  i  $ZrCo_2$  mogą znaleźć zastosowanie do magazynowania wodoru.

Najważniejsza publikacja: S. M. Filipek, V. Paul-Boncour, N. Kuriyama, N. Takeichi, H. Tanaka, R-S Liu, R Wierzbicki, R. Sato, H.T. Kuo, Hydrides of Laves phases intermetallic compounds synthesized under high hydrogen pressure, *Solid State Ionics*, 181 (2010) 306

## 2. Warstwy Molekularne (prof. Włodzimierz Kutner)

Skonstruowaliśmy i wykonaliśmy nowy selektywny piezoelektryczny (akustyczny) czujnik chemiczny oraz opracowaliśmy procedurę oznaczania aminy biogenicznej – adeniny. W celu przygotowania selektywnej warstwy rozpoznającej tego czujnika, tj. polimeru molekularnie wdrukowanego adeniną (MIP), zsyntetyzowaliśmy dwa elektroaktywne monomery funkcyjne: benzo[18korona6]bis(2,2'-bitien5ylo)metan i [4(5,5dimetylo1,3,2dioksaborinano2ylo)fenylo]bis(2,2'-bitien-5-ylo)metan, tworzące w roztworze kompleks z wdrukowywaną adeniną. Molekularne modelowanie ab initio metodą B3LYP/321G(\*) doprowadziło do wyznaczenia zoptymalizowanej struktury tego kompleksu. Kompleks ten został spolimeryzowany elektrochemicznie w warunkach potencjodynamicznych. Za pomocą tej polimeryzacji osadzono wytworzony MIP w postaci cienkiej warstwy na elektrodzie. Odwracalne oddziaływania pomiędzy miejscami wiążącymi MIP a cząsteczką szablonu, za pomocą wiązań koordynacyjnych i poprzez tworzenie kompleksu inkluzyjnego, umożliwiały odwrotne związanie adeniny w MIP a następnie jej usunięcie z tej warstwy. Utlenianiu elektroaktywnej adeniny podczas wdrukowania zapobiegło pokrycie elektrody 200nm poli(2,2'-bitiofenową)



grubości warstwą zaporową. Szablon adeniny wyekstrahowano roztworem mocnej zasady, pozostawiając w MIP luki molekularne odpowiadające kształtem i wielkością cząsteczkom adeniny. Pomiar spektroskopii UVvis, XPS, DPV i EIS potwierdziły całkowitą ekstrakcję szablonu aminy. W opracowanym chemoczuJNIku przetwornikiem sygnału detekcji na sygnał zmian masy był 10MHz rezonator kwarcowy mikrowagi kwarcowej, cięcia AT, o poprzecznych drganiach ścinających objętościowej fali akustycznej. Sprawność analityczną chemosensora określono w warunkach przepływowej analizy wstrzykowej (FIA) stosując mikrogravimetrię piezoelektryczną jako metodę detekcji. Oznaczanie adeniny było selektywne względem związków podobnych strukturalnie lub funkcjonalnie, takich jak guanina, 2-aminopuryna i kwas askorbionowy. Z pomiarów kinetycznych wyznaczono stałe trwałości kompleksów MIP z adeniną lub jej analogami. Wielkości tych stałych wynosiły  $18,00 \pm 2,40 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ ,  $(6,50 \pm 0,09) \times 10^3$ ,  $(1,20 \pm 0,01) \times 10^3$  i  $(0,09 \pm 0,01) \times 10^3 \text{ M}^{-1}$  dla, odpowiednio, adeniny, 2aminopuryny, guaniny i kwasu askorbionowego. Liniowy dynamiczny zakres stężeniowy rozciągał się przynajmniej od 0,1 do 1,0 mM dla  $35\text{-mL min}^{-1}$  szybkości przepływu mieszanych rozpuszczalników acetonitryl : woda (1 : 1, v : v), pH = 6, i 100-mikroL objętości zastrzykiwanego roztworu analitu w roztworze nośnym. Dolna granica wykrywalności wynosiła 5 nM dla  $35\text{L min}^{-1}$  szybkości przepływu i 1-mL objętości zastrzykiwanego roztworu analitu w roztworze nośnym.

Najważniejsza publikacja: Pietrzyk, A.; Suriyanarayanan, S.; Kutner, W.; Chitta, R.; Zandler, M. E.; D'Souza, F. *Biosens. Bioelectron.* 2010, 25, 2522.

### 3. Krystalochemia związków inkluzyjnych (prof. Kinga Suwińska)

Otrzymane zostały molekularne kompleksy inkluzyjne nowego (nie badanego wcześniej w Instytucie) ligandu kukurbit[6]urilu z biologicznie ważnymi cząsteczkami: aminokwasami – D- i L-tryptofanem oraz dipeptydem – glicyloglicyną. Jest to szczególnie ważne w świetle najnowszych doniesień literaturowych o nietoksyczności większości związków z tej grupy, a także ich pochodnych.

Najważniejsza publikacja: Danylyuk O., Lesniewska B., Suwinska K., Matoussi N., Coleman A. W. – Structural Diversity in the Crystalline Complexes of *para*-Sulfonato-calix[4]arene with Bipyridinium Derivatives. *Crystal Growth & Design* (2010). 10, 4542–4549. IF = 4.162.

### 4. Tranzycjometria procesów w stanach ekstremalnych (prof. Stanisław Randzio)

Badano proces chemicznego, mokrego oczyszczania, utleniania i funkcjonalizacji wielościennych nanorurek węglowych (MWCNTs) w celu określenia ich struktury, chemicznych zmian oraz rodzajów wiązań międzyatomowych będących konsekwencją utleniania MWCNTs wodnym roztworem stężonego kwasu azotowego (68 %) w temp. 120 °C. Nie oczyszczone i oczyszczone MWCNTs badano różnymi technikami, jak: TEM, SEM, analizą elementarną, TGA-QMS, EDX, spektroskopiami FTIR, Ramana oraz elektronowymi. Zaproponowana metoda chemicznego oczyszczania i modyfikacji surowych MWCNTs, zawierających sporo amorficznego węgla, pozostałości katalizatora i jego nośnika po syntezie nanorurek węglowych, usuwa niemal w całości wszystkie zanieczyszczenia. Ponadto funkcjonalizuje nanorurki poprzez dołączenie do struktury MWCNTs wielu grup funkcyjnych (jak COOH, OH) zmieniając ich pierwotny hydrofobowy charakter na hydrofilowy. To umożliwi przygotowanie trwałych zawiesin (koloidów) MWCNTs w środowisku wodnym.

Zgłoszenie patentowe: „Sposób modyfikowaniaa norurek węglowych, zwłaszcza wielościennych”, zgłoszenie oznaczono numerem P .391451 (WIM PW oraz IChF PAN).

Najważniejsza publikacja: L. Stobinski, B. Lesiak, L. Kover, J. Toth, S. Biniak, G. Trykowski, J. Judek, Multiwall carbon nanotubes purification and oxidation by nitric acid studied by the FTIR and electron spectroscopy methods, *Journal of Alloys and Compounds*, 501 (1) (2010) pp.77-84

### 5. Zachowania fazowe i dynamika w roztworach polimerów (dr hab. Jacek Gregorowicz)

Hiperrozgałęziony poliester z hydroksylowymi grupami końcowymi podstawionymi nasyconymi kwasami tłuszczowymi o 20 i 22 atomach węgla w łańcuchu – właściwości czystego polimeru i jego zachowanie w roztworach. Hiperrozgałęzione poliestry o zmodyfikowanych grupach końcowych mając

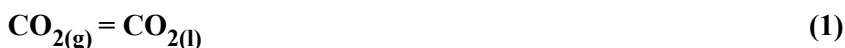
bardzo ciekawe właściwości fizykochemiczne i stosunkowo niewielkie koszty wytwarzania stwarzają szerokie możliwości potencjalnych zastosowań. Badany polimer został dokładnie scharakteryzowany. Wyznaczono średnie masy cząsteczkowe, indeks polidispersyjności, stopień rozgałęzień oraz stopień podstawienia końcowych grup hydroksylowych nasyconymi kwasami tłuszczowymi. W tym celu wykonano badania chromatografią żelową oraz badania  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR. Średnie masy molowe  $M_w$  i  $M_n$  wynosiły odpowiednio 17630 g/mol i 8160 g/mol, natomiast indeks polidispersyjności wynosi około 2. Stopień rozgałęzień wewnątrz polimeru, oszacowany z pomiarów NMR, wynosi 0.45. Wydaje się więc, że cząsteczka badanego poliestru bardziej jest strukturą gwiaździstą niż hiperrozgałęzioną. W temperaturze pokojowej polimer jest substancją stałą o bardzo dobrze, jak na polimer, określonej temperaturze topnienia. W odróżnieniu od polimerów liniowych faza stała jest bardzo krucha. Wykonano pomiary WAXS i SAXS. Otrzymane wyniki wyraźnie wskazują, że polimer krystalizuje w formie lameli układających się w warstwy. Taka struktura fazy stałej tłumaczy jego właściwości mechaniczne. Wykonane zdjęcia SEM potwierdzają strukturę lamelarną materiału. Badany poliestr jest dobrze rozpuszczalny w węglowodorach, natomiast z alifatycznymi alkoholami tworzy lukę mieszalności. Rozpuszczalność rośnie wraz ze wzrostem łańcucha alkilowego alkoholu. Wielkość luki zależy od stopnia rozgałęzienia łańcucha i zawartości wody w alkoholu. Poniżej temperatury około 313 K stały poliestr wytrąca się z roztworów. Struktura wytrąconego polimeru z roztworu nie różni się od struktury krystalicznej polimeru otrzymanego przez schłodzenie czystego stopionego poliestru. Natomiast najciekawsze jest to, że przy chłodzeniu jednohydroksylowe alkohole tworzą wraz z badanym poliestrem żełe. Takiego efektu nie obserwuje się dla węglowodorów i dwu-hydroksylowych alkoholi. Przeprowadzono również badania monowarstw poliestru na granicy warstw woda/powietrze i na stałych podłożach. Na bazie otrzymanych wyników postają dwie publikacje. Publikacja na temat monowarstw jest już gotowa. Druga dotycząca roztworów polimeru i struktury fazy stałej jest w trakcie przygotowywania.

## 6. NMR ciała stałego - dynamika molekularna i dynamika wiązania wodorowego (dr Piotr Bernatowicz)

Celem projektu było możliwie dokładne scharakteryzowanie dynamiki molekularnej w serii cyklodekstryn (CD) o różnych rozmiarach pierścienia makrocyklicznego. Metodami spinowej relaksacji jądrowej przebadaliśmy związki CD6-CD12, czyli zawierające od 6 do 12 jednostek glukopiranozowych w makrocyklu. W trzech polach magnetycznych wykonaliśmy zatem dla ich roztworów wodnych pomiary relaksacji podłużnej jąder  $^{13}\text{C}$  oraz jądrowego wzmocnienia Overhausera  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  (tzw. efekt NOE). Otrzymane dane poddaliśmy obróbce numerycznej zakładając model osiowej symetrii tensora dyfuzji rotacyjnej. W wyniku tej analizy otrzymaliśmy dla każdej z molekuł składowe jej tensora dyfuzji rotacyjnej oraz oszacowanie skali czasu na jakiej zachodzi w tych molekułach dynamika wewnętrzna. Tę ostatnią założyliśmy w postaci ograniczonych obrotów każdej z jednostek glukopiranozowych wokół osi łączącej jej terminalne (glikozydowe) atomy tlenu O1 i O4. Okazało się, że dla molekuł CD6-CD7 dynamika wewnętrzna jest szybsza od globalnej reorientacji molekuł, zaś dla CD8-CD12 jest na odwrót. Dodatkowo w wyniku naszej analizy odtworzyliśmy takie szczegóły geometrii CD jak kąty nachylenia pierścieni glukopiranozowych w stosunku do pierścieni makrocyklicznych oraz kąty jakie tworzą z pierścieniami makrocyklicznymi osie O1-O4. Nasze wyniki dotyczące geometrii okazały się być zgodne z dostępnymi w literaturze wynikami obliczeń metodami dynamiki molekularnej oraz z wynikami badań krystalograficznych. Powyższa praca została wykonana, aby udowodnić, że wyprowadzony wcześniej w naszej grupie formalizmy matematyczny wiążący dynamikę molekularną z niektórymi obserwacjami NMR (tzw. gęstościami widmowymi) można z powodzeniem wykorzystać do precyzyjnych badań dynamiki molekularnej (zarówno globalnej jak i wewnętrznej) w związkach powszechnie uważanych za "trudne".

## 7. Termodynamika dla ekologii – procesy regulacyjne (dr hab. Paweł Gierycz)

Przeprowadzono symulacje procesu tworzenia nanometrycznego węglanu wapnia w rotacyjnym reaktorze dyskowym. Reakcja tworzenia  $\text{CaCO}_3$  przebiega czteroetapowo według następującego schematu:





Założono, że cały proces przebiega w cienkim filmie zawiesiny  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  w wodzie, formującym się na powierzchni dysków reaktora w czasie ich obrotów. Do obliczeń symulacyjnych zastosowano więc „teorie tworzenia cienkiego filmu” przy następujących dodatkowych założeniach:

- stężenie  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  w wodzie jest zdefiniowane przez rozpuszczalność wodorotlenku wapnia i utrzymywane na stałym poziomie tak długo jak występuje jego nadmiar w roztworze. Po tym czasie maleje eksponentalnie,
- stężenie  $\text{CO}_2$  jest stałe i równe stężeniu równowagowemu układu dwutlenek węgla – woda,
- powstający  $\text{CaCO}_3$  rozpuszcza się w wodzie zgodnie z kinetyką procesu rozpuszczania, po przekroczeniu poziomu nasycenia,
- wzrost masy powstających kryształów  $\text{CaCO}_3$  jest proporcjonalny do ich powierzchni,
- interwał czasowy obliczeń dotyczących powstawania zarodków i wzrostu kryształów jest równy czasowi zaniku  $\text{CO}_2$ ,
- zmiany szybkości obrotowej dysku są określone poprzez zmianę czasu całego procesu.

Wyniki symulacji jednoznacznie pokazały, że proces tworzenia zarodków jest wielokrotnie (kilka rzędów) szybszy od procesu wzrostu kryształów wobec tego on determinuje wielkość powstałych kryształów. Otrzymane kryształy bez względu na etap reakcji powinny być zawsze tej samej wielkości. Wyniki symulacji są w pełni zgodne z wynikami eksperymentalnymi (zdjęcia wykonane przy użyciu SEM i TEM) otrzymanymi dla różnych faz prowadzonego procesu (po 2, 4, 6, 7, i 9 min – zakończenie reakcji). Wyjaśniają one, nie tylko dlaczego zawsze, bez względu na warunki prowadzenia procesu otrzymywane były jednorodne nanokryształy węglanu wapnia, ale również dlaczego w przypadku reakcji tworzenia nanometrycznych kryształów węglanu wapnia w rotacyjnym reaktorze dyskowym tworzy się zawsze tylko jedna, najtrwalsza odmiana polimorficzna  $\text{CaCO}_3$ ,

czyli kalcyt. Jest to bardzo pożądane, ale nietypowe zjawisko, ponieważ w zdecydowanej większości procesów otrzymywania krystalicznego węglanu wapnia tworzą się dwie lub nawet trzy jego odmiany polimorficzne.

Najważniejsza publikacja: K.Kędra-Królik, P.Gierycz *“Simulation of nucleation and growing of  $\text{CaCO}_3$  nanoparticles obtained in the rotating disk reactor”*. J. Cryst. Growth 312 (2010) 1945–1951.

Najważniejsze zgłoszenie patentowe: B.Golankiewicz, M.Koźbial, W.Zielenkiewicz, P.Gierycz *„Sposób zwiększania rozpuszczalności pochodnych acyklowiru”* Numer zgłoszenia P-390313. Data zgłoszenia: 2009.12.22.

## 8. Struktura a selektywność inkluzyjnych kompleksów supramolekularnych (prof. Janusz Lipkowski)

Została opracowana nowa metoda wyznaczania stałej trwałości ligand – selektor. Metoda ta opiera się na pomiarze efektywnego współczynnika dyfuzji ligandu w czasie jego laminarnego przepływu przez długą (około 25m) i cienką ( $0.254\text{mm} \pm 0.05 \text{ mm ID}$ ) kapilarę bez selektora i w jego obecności. Uzyskane piki były analizowane w oparciu o teorię dyspersji Taylora. Albumina cielęca (BSA) i cyklodekstryna (CD) były użyte jako modelowe selektory. Jako modelowe ligandy wykorzystano warfarynę, propranolol, noskapinę i kwas salicylowy dla BSA i 4-nitrofenol dla CD. Otrzymane wyniki zgadzały się z wynikami literaturowymi jak również z wynikami z chromatografii cieczowej wykonanymi w naszym laboratorium w celu porównania obu metod. Opracowana metoda może być wykorzystana do oceny równowagi reakcji chemicznych zachodzących np. w osoczu krwi.

Najważniejsza publikacja: Bielejewska A, Bylina A, Duszczyk K, Fialkowski M, Holyst R.-

„Evaluation of Ligand-Selector Interaction from Effective Diffusion Coefficient” *Anal. Chem.*, 2010, 82, 5463-5469.

## 9. Kompleksy koordynacyjne i materiały funkcjonalne (prof. Janusz Lewiński)

W trakcie badań nad związkami alkoksylowymi cynku, jako prekursorami ZnO, odkryliśmy, że ta grupa związków ulega wyjątkowo oryginalnym transformacjom w ciele stałym zarówno w procesie ich desolvatacji

kompleksów jak i ucierania w moździerzu. W wyniku desolwatacji pod obniżonym ciśnieniem dimerycznej pochodnej  $[\text{tBuZnO}^{\text{tBu}}(\text{THF})]_2$  (A) otrzymaliśmy i strukturalnie scharakteryzowaliśmy bezprecedensowy przykład trimerycznego związku alkoksylogowego cynku  $[\text{tBuZnO}^{\text{tBu}}]_3$  (B). Trimeryczna forma B nie była możliwa do otrzymania poprzez klasyczne metody mokre, ponieważ jak wykazały nasze badania, ta forma strukturalna związku jest nietrwała w roztworze. Należy podkreślić również, że odkryta forma trimeryczna nie była dotychczas zaobserwowana czy nawet postulowana dla związków typu [RMOR].

W wyniku dalszych badań odkryliśmy, że ucieranie kompleksu trimerycznego  $[\text{tBuZnOtBu}]_3$  (B) powoduje jego transformację do kompleksu tetramerycznego  $[\text{tBuZnOtBu}]_4$  (C). Jest to pierwszy przypadek transformacji klasterek-w-klasterek w wyniku ucierania ciał stałych. Wynik ten pokazuje, że zastosowanie przekształceń mechanosyntetycznych pozwala na uzyskanie zupełnie nowych jakościowo form związków chemicznych. Odkrycie to zostało opublikowane jako komunikat w prestiżowym czasopiśmie *Angewandte Chemie*. Kontynuując badania nad wykorzystaniem kompleksów metali stabilizowanych alkaloidami chinolinowymi, jako chiralnymi molekularnymi jednostkami budulcowymi do konstruowania homochiralnych materiałów porowatych, odkryliśmy, że dinuklearny kompleks  $[\text{Me}_2\text{Al}(\mu\text{-CN})]_2$  (CN = deprotonowana cychonina) ulega samoorganizacji w środowisku THF z wykorzystaniem oddziaływań niekowalencyjnych do homochiralnego materiału typu *NPM* (ang. noncovalent porous material) o regularnej, elastycznej budowie, zawierający cząsteczki THF zainkludowane w sieci równoległych 1D otwartych mikrokanalów. Badania termogravimetryczne oraz PXRD pokazały, że uzyskany mikroporowaty materiał posiada tzw. permanentną porowatość, tj. zdolność do odwracalnego wprowadzania/usuwania gościa do matrycy porowatej. Badania sorpcji gazów  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{CH}_4$  pokazały unikalne właściwości materiału. Układ ten wykazuje m. in. rekordowe wartości początkowych izosterycznych ciepł adsorpcji gazów  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$  i  $\text{CH}_4$ , a także tzw. efekt temperaturowego uruchamiania adsorpcji  $\text{N}_2$ . Materiał ten charakteryzuje bardzo wysoka selektywność w procesach rozdzielania  $\text{H}_2/\text{N}_2$  (28:1, 77 K) oraz  $\text{CO}_2/\text{N}_2$  (74:1, 273 K) pod niskimi ciśnieniami.

Najważniejsze publikacje: *Angew. Chem. Int. Ed.*. Solid-State Conversion of the Solvated Dimer  $[\{\text{tBuZn}(\text{m-OtBu})(\text{thf})\}_2]$  into a Long Overlooked Trimeric  $[\{\text{tBuZnOtBu}\}_3]$  Species

J. Lewiński, M. Dutkiewicz, M. Lesiuk, W. Śliwiński, K. Zelga, I. Justyniak, J. Lipkowski, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, 8266. Cinchona Alkaloid–Metal Complexes: Noncovalent Porous Materials with Unique Gas Separation Properties J. Lewiński, T. Kaczorowski, D. Prochowicz, T. Lipińska, I. Justyniak, Z. Kaszukur, J. Lipkowski, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, 7035.

Najważniejsze zgłoszenie patentowe: Zgłoszenie patentowe nr P-391776 Związki luminescencyjne, sposób wytwarzania związków luminescencyjnych oraz ich zastosowanie, J. Lewiński, K. Sokołowski

## 10. Fizykochemia Miękkiej Materii (prof. Robert Hołyst)

Przeprowadziliśmy eksperymenty cięcia DNA przez enzym w roztworze polimerów i glicerolu w celu pokazanie wpływu zatłoczonego środowiska na reakcje biochemiczne – głównie zależało nam na pokazaniu, że o szybkości reakcji decyduje nanolepkość, a nie makrolepkość roztworu. Dla przykładu użyliśmy enzymu HindIII do cięcia DNA (plazmid PUC19) w roztworze wodnym „zatłoczonym” polimerem (PEG 6000 i 800 000) oraz glicerolem. Stężenie polimeru PEG 6000 i glicerolu zmienialiśmy w zakresie od 1% do 40% (procent wagowy). W przypadku PEG 800 000 stężenie zmienialiśmy od 0,1% do 1-2%. Lepkość roztworu PEG 6000 i PEG 800 000 zmieniała się od lepkości wody do lepkości 100-200 razy większej. W przypadku glicerolu lepkość roztworu dla największych stężeń wyniosła około kilku lepkości wody. Zaobserwowaliśmy, że stała szybkości reakcji na cięcie DNA przez enzym nie zależy od lepkości roztworu dla PEG 800 000 – praktycznie reakcja zachodziła tak samo jak w buforze, pomimo, że makroskopowa lepkość była 100-200 razy większa niż lepkość buforu. Natomiast reakcja została znacznie spowolniona w roztworze PEG 6000. Odkryliśmy, że obok wyraźnego wpływu nanolepkości na stałą szybkości reakcji występują dwa dodatkowe efekty: siły entropowe nazywane „depletion interactions” oraz siły entropowe nazywane „disjoning pressure”. W PEG 6000 dla stężenia powyżej 7% praktycznie zatrzymaliśmy reakcję cięcia DNA przez enzym. Ustaliliśmy w eksperymentach z użyciem dynamicznego rozpraszania światła oraz spektroskopii korelacji fluorescencji, że powyżej tej koncentracji

następuje agregacja i prawdopodobnie kondensacja plazmidu. Dodatkowo podejrzewamy (konieczne są kolejne eksperymenty), że enzym również tworzy trwałe kompleksy z plazmidem w miejscach niespecyficznych, pod wpływem tych samych sił. Oba efekty prowadzące do izolacji miejsca cięcia na DNA i enzymu tnącego (co zatrzymuje reakcję) i wynikają z oddziaływań entropowych wymuszonych między białkiem a plazmidem oraz pomiędzy plazmidami przez PEG 6000. W przypadku glicerolu spowolnienie reakcji ponad to co wynikałoby z nanolepkości roztworu ma najprawdopodobniej przyczynę w oddziaływaniach wynikających z ograniczonej geometrii – glicerol może tworzyć stabilne struktury w nanoskali między powierzchnią białka a DNA i przez to tworzyć barierę entropową dla tej reakcji (oddziaływania nazywane „disjonng pressure”). Dalsze eksperymenty w tym kierunku są wskazane. Praca została wysłana do druku do Soft Matter.

Najważniejsza publikacja [Reversible aggregation of X-Shaped bolaamphiphiles with partially fluorinated lateral chains at the air/water interface](#)

Author(s): Niton P, Zywockinski A, Holyst R, Kieffer, R, Tschierske C., Paczesny J, Pocięcha D, Górecka E, Chem.Comm. 46, 1896-1898 (2010).

Najważniejsze zgłoszenie patentowe: Zgłoszenie patentowe nr P-390798 Platforma

do pomiarów powierzchniowo wzmocnionego efektu Ramana I. Dziecielewski,

R. Holyst, A. Kamińska, S. Porowski, T. Suski, J. Weyher.

## 11. Mikroprzepływów i płynów złożonych (dr hab. Piotr Garstecki)

Grupa Mikroprzepływów i Płynów Złożonych IChF PAN skonstruowała układ mikroprzepływowy umożliwiający łączenie strumieni kropelek zawierających różne roztwory. Nowy układ pozwala na wytwarzanie i precyzyjne kontrolowanie stężeń mikromieszanin reakcyjnych, działa przy tym kilkukrotnie szybciej i operuje na mniejszych objętościach płynów niż obecnie popularna w laboratoriach metoda macierzy dołkowych. Opracowane urządzenie pozwoli przeprowadzić w ciągu jednego dnia nawet kilkadziesiąt tysięcy doświadczeń biochemicznych. Skonstruowany układ mikroprzepływowy jest miniaturowym reaktorem chemicznym rozmiarów karty kredytowej. Reakcje zachodzą we wnętrzach drobnych kropelek, przesuujących się wzdłuż odpowiednio zaprojektowanych kanalików. Objętości kropelek są kontrolowane za pomocą komputera i zazwyczaj wynoszą ok. jednego mikrolitra. Układ jest w stanie pracować z szybkością pozwalającą na mieszanie do trzech kropelek na sekundę. Dodatkowo zamiast trudnych w realizacji mikrozaworów, naukowcy wykorzystali typowe, tanie i duże zawory, które umieścili poza urządzeniem. Rozwiązanie to gwarantuje modularność systemów badawczych – elektromechanika pozostaje poza mikro-chipem, a sama płytka zawiera jedynie kanały i może być bardzo tanio wytwarzana. Układ mikroprzepływowy z IChF PAN może być szczególnie przydatny w badaniach mikrobiologicznych. W przeprowadzonych testach każda mikrokropla z bakteriami łączyła się z dwiema mikrokroplami antybiotyków, chlorafenikolem i tetracykliną, przy czym objętości tych ostatnich zmieniano dynamicznie, regulując w ten sposób proporcje między lekami. Po inkubacji bakterii sekwencja kropli przepływała przez układ podłączony do spektrofotometru dzięki czemu w łatwy sposób określono żywotność kolonii w poszczególnych kroplach.

Najważniejsza publikacja: K. Churski i wsp., *Lab Chip*, 10, 816-818.

## 12. Organizacja i Synteza Nanocząstek (dr hab. Marcin Fiałkowski)

W bieżącym roku program badaczy grupy skupiał się na badaniu własności trój i dwuwymiarowych struktur tworzonych przez naładowane nanocząstki. Główne nasze osiągnięcie stanowi opracowanie nowej metody pokrywania powierzchni ciał stałych warstwami złotych nanocząstek. W grupie opracowaliśmy i zgłosiliśmy jako zgłoszenie patentowe nową metodę pokrywania powierzchni hydrofilowych ciał stałych porowatą warstwą złota o bardzo rozbudowanej powierzchni. Omawiana metoda pozwala na bardzo szybkie, tanie i niezwykle proste pokrywanie powierzchni ciał stałych złotymi mikrokwiatami lub złotymi mikrokwiatami i złotymi nanocząstkami, a także kontrolę gęstości pokrycia i morfologii złotych cząstek. Wynalazek pozwala zarówno na otrzymywanie mono- jak też wielowarstw złożonych ze złotych struktur o rozmiarach nano i mikrometrowych, które nazwaliśmy „mikrokwiatkami”. Zdjęcie pojedynczego mikrokwiatka oraz rozbudowanej struktury porowatej zbudowanej z podobnych mikrokwiatków, zostały otrzymane za pomocą

mikroskopii SEM. Omawiana metoda nie wymaga stosowania skomplikowanych odczynników, rozpuszczalników organicznych i metali ciężkich ani specjalistycznego sprzętu. W celu otrzymania złotych mikrokwiatów nie ma też potrzeby stosowania żadnych złotych nano-prekursorów. W literaturze ten sposób wytwarzania nanocząstek nazywany jest *seedless method*. Ogromną zaletą naszej metody jest fakt, że jest ona jednoetapowa (*one-pot method*) i wymaga użycia tylko jednego roztworu reakcyjnego. W naszej metodzie wykorzystaliśmy zjawisko nukleacji nanoklastrów w roztworze reakcyjnym oraz ich bezpośrednią adsorpcję na podłożu. Polega na zanurzeniu ciała stałego, na przykład krzemowej płytki, w wodnym roztworze zawierającym źródło kationów złota Au(III), jakim jest, na przykład, kwas tetrachlorozłotowy  $\text{HAuCl}_4$ , oraz ich reduktora – w naszym przypadku była to hydroksyloamina,  $\text{NH}_2\text{OH}$ , w postaci chlorowodoru. Następnie płytkę płucze się w wodzie i – opcjonalnie – rozpuszczalniku organicznym i pozostawia do wyschnięcia. Badania procesów nukleacji i adsorpcji nano-klastrów pozwoliły nam zrozumieć ich mechanizm i dzięki temu kontrolować morfologię mikrokwiatów tworzonych na powierzchni ciała stałego. Na przykład, aby otrzymać mikrokwiatki o silnie rozwiniętej powierzchni, należy stosować duże nadmiary hydroksyloaminy. Mniejsze nadmiary reduktora w stosunku do kwasu tetrachlorozłotowego pozwalają na otrzymanie mniej pofalowanych struktur. Stopień „wygładzenia” struktury mikrokwiatów można natomiast kontrolować za pomocą czasu ekspozycji powierzchni w roztworze reakcyjnym. Udało się nam zastosować naszą metodę do pokrywania powierzchni szkła, ITO, krzemu, GaN, oraz folii aluminiowej. Sfunkcjonalizowane naszą metodą powierzchnie zostały również z powodzeniem wykorzystane jako tak zwane platformy do wzmocnionej powierzchniowo spektroskopii Ramana (SERS). Pomiary SERS przeprowadzone dla kwasu p-merkaptobenzoesowego oraz dla L-alaniny udowodniły olbrzymie zalety tych platform, dając wzmocnienie sygnału rzędu, odpowiednio,  $10^8$  oraz  $10^6$ .

Najważniejsza publikacja: E. Kalwarczyk, M. Goloś, R. Hołyst, M. Fiałkowski, *Polymer-Induced Ordering and Phase Separation in Ionic Surfactants* J. Coll. Interf. Sci, 26, 93 (2010).

Najważniejsze zgłoszenie patentowe: K. Winkler, M. Fiałkowski, A. Kamińska, R. Hołyst, *Sposób pokrywania hydrofilowych ciał stałych warstwą złota o rozbudowanej powierzchni oraz hydrofilowe ciało stałe pokryte warstwą złota o rozbudowanej powierzchni*, P-392222.

### 13. Kwantowo-mechaniczne badanie molekuł i metali (prof. Andrzej Holas)

W 2010 r. znacznie udoskonalono metodę wyznaczania ścisłego potencjału wymiennego (opracowaną w naszej grupie), która wykorzystuje jedynie rozwiązania równań Kohn-Shama (KS) i Hartree-Focka (HF) zamiast rozwiązywania układu równań różniczkowych (pochodzących od równania OEP). Udoskonalony iteracyjny algorytm znajdowania kolejnych przybliżeń polega na wyznaczaniu przesunięć orbitalnych (OS) i przesunięć energetycznych (ES), obecnych w jego postaci kanonicznej, za pomocą orbitali i energii orbitalnych otrzymanych z równań typu HF i KS, i odpowiedniej modyfikacji ES i OS w kolejnych krokach. Modyfikacja ES wynika z minimalizacji funkcjonału będącego miarą odstępstwa od równania OEP i jest *nowym elementem tego algorytmu*, który znakomicie przyspiesza jego zbieżność. W obliczeniach testowych wykonanych dla atomów o zamkniętych (pod)powłokach elektronowych (przy zastosowaniu metody pseudospektralnej do reprezentacji orbitali i OS) przeprowadzonych w przybliżeniu „exchange-only” (tj. zaniedbując efekty korelacyjne) osiągnięcie zbieżnej gęstości elektronowej  $n(r)$  i jednocześnie odpowiadającego jej ścisłego potencjału wymiennego wymaga jedynie 20 kroków iteracji po  $n(r)$ , przy jedynie 2 krokach iteracyjnych (dla każdej gęstości). Wysoką dokładność otrzymano również dla energii orbitalnych.

Najważniejsza publikacja: M. Cinal, A. Holas, *Exact exchange potential evaluated solely from the occupied Kohn-Sham and Hartree-Fock solutions*, przygotowane do druku (zostanie przesłane do Physical Review A do 15.12.2010).

Kompleksy cyklodekstryn, CDn, są jedyną grupą układów supramolekularnych, które znalazły liczne zastosowania praktyczne. Na podstawie pomiarów rentgenowskich przez długie lata uważano, że cyklodekstryny mają budowę sztywnego ściętego stożka [2]. Obecnie wiadomo, że w roztworach są to układy bardzo mobilne. Nasze pomiary temperaturowe NMR polikrystalicznej próbki kompleksu cis-dekaliny 2 w b-CD 1 ciała stałego pokazały, że układy te nie są sztywne nawet w kryształach, w którym cząsteczka gościa w kompleksie inwertuje nawet w temperaturze pokojowej. Jest to informacja istotna również ze względów praktycznych, ponieważ

kompleksy cyklodekstryn używane są m.in. jako nośniki leków.

Najważniejsza publikacja H. Dodziuk, M. Pietrzak, "CPMAS study of rings inversion of *cis*-decalin in the solid state when complexed with  $\beta$ -cyclodextrin", *Austr. J. Chem.*, 2010, 63, 709 – 711.

#### 14. Badanie zjawisk nieliniowej dynamiki chemicznej (prof. Andrzej Kawczyński)

Jednym z poszukiwanych zjawisk w nieliniowych układach reakcja-dyfuzja były i są zlokalizowane struktury, które w pewnych wyróżnionych obszarach przestrzeni zachowują się inaczej aniżeli w pozostałych obszarach. Jedną z inspiracji do takich poszukiwań jest spontaniczne pojawianie się różnego typu guzów na jednorodnych tkankach w układach biologicznych. Pierwszym modelem dla takich zjawisk był opracowany przeze mnie wiele lat temu model pulsara chemicznego, w którym front fali trigerowej oscylował periodycznie w czasie i przestrzeni. W ostatnim czasie zostały eksperymentalnie zaobserwowane w układach chemicznych tzw. oscylony, w których stężenia reagentów oscylują w czasie w wyróżnionych obszarach przestrzeni, podczas gdy w pozostałej przestrzeni stężenia reagentów pozostają stałe w czasie i przestrzeni. W mojej pracy „Oscillons localized inside breathing periodical in a two variable model of a one-dimensional infinite excitable reaction-diffusion system”, *J. Phys. Chem. A*, 114, 8217-8222 (2010) przedstawiłem model bardziej złożonego zjawiska z pojawianiem się oscylonu. W jednowymiarowym pobudliwym układzie chemicznym generowany jest impuls pobudzenia, który poprzez swój podział generuje za sobą periodyczną strukturę w postaci pulsów pobudzenia. Co pewną liczbę takich pulsów generowany jest oscylon, w którym stężenia zmieniają się periodycznie. Po emisji kolejnego impulsu pobudzenia generowany jest kolejny fragment struktury, a następnie kolejny oscylon. W sąsiedztwie generowanych oscylonów pulsy wykazują także oscylacje. W nieskończonym układzie pojawia się nieskończona liczba impulsów pobudzenia, za którymi generowana jest nieskończona liczba oscylonów rozdzielonych periodycznymi pulsami. Model układu oparty jest na dwóch sprzężonych reakcjach enzymatycznych, z których jedna jest inhibitowana nadmiarem substratu i produktu.

#### 15. Struktura a właściwości katalityczne silnie zdyspergowanych metali na nośniku (prof. Zbigniew Karpiński)

Aktywność katalityczna Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w reakcji wodoroodchlorowania CCl<sub>4</sub> wykazuje silną odwrotną korelację z dyspersją metalu. Bardzo małe cząstki platyny (< 2 nm) wykazują bardzo niską aktywność katalityczną. Podobny, choć znacząco słabszy, trend, wykazuje platyna osadzona na SiO<sub>2</sub>. Tak znaczący wpływ nośnika przypisuje się blokowaniu chlorem bardzo małych cząstek platyny oddziaływujących z centrami kwasowymi Lewisa tlenku glinu. Oddziaływania te prowadzą do tworzenia elektrodeficytowych centrów Pt<sup>σ+</sup>, które szybko dezaktywują się chlorem. Tak silna zależność aktywności katalitycznej od dyspersji metalu wskazuje, że nawet niewielkie zmiany wielkości cząstek platyny w trakcie reakcji, lub regeneracji katalizatora, muszą być brane pod uwagę przy analizie wyników kinetycznych. Usuwanie depozytów węglowych po reakcji w atmosferze utleniającej nie tylko regeneruje wyjściowe zachowanie katalizatorów Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ale prowadząc do wzrostu cząstek metalu, podnosi znacząco aktywność katalityczną liczoną na atom powierzchniowy metalu, w zgodności ze znalezioną korelacją aktywność-dyspersja metalu. W przypadku katalizatorów Pt/SiO<sub>2</sub> regeneracja również przynosi podobny efekt.

Najważniejsza publikacja: M. Bonarowska, Z. Kaszkur, L. Kępiński, Z. Karpiński, „Hydrodechlorination of tetrachloromethane on alumina- and silica-supported platinum catalysts”, *Appl. Catal. B: Environmental* 99 (2010) 248-256.

#### 16. Struktura i Dynamika Materiałów Nanokrystalicznych (dr hab. Zbigniew Kaszkur)

Zjawisko redispersji krystalitów metali przejściowych osadzonych na różnych nośnikach było obserwowane w szeregu pracach ale jego mechanizm nigdy nie został wyjaśniony. W przypadku metali osadzonych na zeolitach, efekt przypisywano zwiększonej mobilności jonów (np. Pd(NO)<sub>x</sub><sup>2+</sup>) dyfundujących w głąb kanałów zeolitu. (np. Sachtler, Zhang in “Zeolite-Supported Catalysts”). Zaobserwowaliśmy redispersję nanokrystalitów Pt osadzonych na SiO<sub>2</sub>, in situ. W atmosferze NO w temperaturach bliskich 100 st.C. po pewnym okresie czasu

mierzony średni rozmiar krystalitów dość gwałtownie zmniejszał się z ok. 6.5nm do ok.4.5nm z wyraźną zmianą morfologii krystalitów lub ich rozkładu wielkości. Nie zaobserwowano tworzenia się innych faz krystalograficznych. Mechanizm tego efektu jest złożony a czynnik wyzwalający nadal niejasny. Podjęto również próby potwierdzenia obserwacji redispersji nanokrystalitów Pd opisywanej w pracy Newton et al., *Angew.Chem.Int.Ed.*,46, 8629(2007). Doprowadziły one do stwierdzenia zachodzącej w temperaturze 400 st.C w atmosferze 5%NO +He, szybkiej, odwracalnej przemiany fazowej Pd w PdO. Efekt redispersji jest więc w istocie pozorny i związany z mechanizmem procesu utleniania. Kontynuowano badania redukcji wodorem tlenku żelaza (III). Pomiar postępu tej redukcji przy użyciu XRD potwierdziły wyniki wcześniejszych pomiarów metodą TPR. Stwierdzono, że redukcja wodorem  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  przebiega: (i) w trzech etapach,  $\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 \rightarrow \text{Fe}_{0.947}\text{O} \rightarrow \text{Fe}$ , gdy stosunek prężności pary wodnej i wodoru ( $P_{\text{H}_2\text{O}}/P_{\text{H}_2}$ ) jest znaczny, (ii) w dwóch etapach,  $\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 \rightarrow \text{Fe}$ , gdy stosunek ten jest mały oraz (iii) w jednym etapie,  $\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{Fe}$ , gdy stosunek ten jest znikomo mały.

Najważniejsza publikacja: Zieliński J., Zglinicka I., Znak L., Kaszukur Z., *Appl. Catal. A*, 381, 191-196 (2010)).

## 17. Modelowanie w zakresie fizykochemii aerozoli (dr hab. Lech Gmachowski)

Badano strukturę drobnych agregatów powstających w powietrzu, gdzie średnia droga swobodna cząsteczek gazu przewyższa wymiar liniowy cząstek aerozolowych. W tym zakresie średnia droga swobodna dyfundujących cząstek rośnie z redukcją wymiaru liniowego, co ma wpływ na wymiar fraktalny trajektorii cząstek. Symulowano ewolucję wymiaru fraktalnego agregatów z wymiarem fraktalnym trajektorii dla sekwencji klaster-klaster jak i agregacji kinetycznej, zachodzącej w populacji agregatów. Wymiar fraktalny sekwencji klaster-klaster określano z równania aktu agregacji przy założeniu tych samych mas i wymiarów fraktalnych obu uczestników aktu agregacji. Struktura agregatów powstających w procesie kinetycznym, charakteryzowana średnim wymiarem fraktalnym, określana była przez maksymalizację entropii informacyjnej rozkładu prawdopodobieństwa agregacji z wykorzystaniem bilansu masy populacji, przy założeniu, że jest on logarytmiczno-normalny. Stała szybkości agregacji wzięta była w formie iloczynu w potęgę, której wykładnik charakteryzuje zależność aktywności agregacyjnej od masy agregatu. Obliczenia przeprowadzono dla dwóch oczekiwanych wartości tego wykładnika w całym zakresie wymiaru fraktalnego trajektorii agregatów – od ruchu balistycznego do brownowskiego. Otrzymane linie wskazują na spadek wymiaru fraktalnego agregatów w miarę ich wzrostu. Otrzymany wynik ma potwierdzenie w eksperymencie (J. Cai, N. Lu and C. M. Sorensen, *Langmuir*, 9 (1993) 2861) polegającym na badaniu struktury agregatów cząstek sadzy o promieniu 12-15 nm. Agregaty pobierano z dwóch poziomów nad powierzchnią palnika metanowo-tlenowego. Pobrane z niższego poziomu (krótszy czas agregacji) miały średni promień 70 nm i wymiar fraktalny 1,93, podczas gdy pobrane z wyższego poziomu miały promień 110 nm i wymiar fraktalny 1,72.

Najważniejsza publikacja *Fractal dimension of aggregates formed in the slip regime*

Gmachowski L, *Colloids Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* 363, 119-123 (2010).

## 18. Wodór elektrolityczny w procesach korozji oraz jego wytwarzanie i magazynowanie jako nośnika energii (prof. Tadeusz Zakroczyński)

Praca zmierza do poznania działania warstw tlenkowych powstających na powierzchni katod podczas elektrochemicznego otrzymywania wodoru i do takiej ich modyfikacji, aby korzystnie wpływały na proces wydzielania wodoru i jednocześnie stanowiły przeszkodę dla wnikania wodoru do metalu. Jest to ważne w kontekście otrzymywania wodoru jako alternatywnego źródła energii, oraz ograniczenia jego wnikania do materiałów konstrukcyjnych i do katod stosowanych w elektrolizerach wody i w galwanotechnice. Procesy te prowadzone są w środowiskach alkalicznych. Badano wnikanie wodoru do czystego żelaza z roztworu 0,1 M NaOH po nałożeniu polaryzacji katodowej lub anodowej na powierzchnię, która uprzednio została poddana wstępnej polaryzacji przy różnych potencjalach celem wytworzenia określonych warstw powierzchniowych. Wnikanie wodoru oznaczano metodą elektrochemiczną Devanathana-Stachurskiego na membranie o grubości



35 mikrom, stosując nabór danych z szybkością  $10^4 \text{ s}^{-1}$ . Maksima prądu mierzonego na wejściowej stronie żelaznej membrany wskazują, jakie reakcje zachodzą przy danym potencjale, a odpowiadające im zmiany szybkości przenikania wodoru informują o procesach zachodzących na powierzchni żelaza z udziałem wodoru. Stwierdzono, że na przenikanie wodoru w znacznym stopniu wpływa obecność na niej produktów utleniania żelaza lub redukcji tlenków. Po wstępnej katodowej polaryzacji, wodór wnika do żelaza po szybkim nałożeniu dowolnego potencjału anodowego i wnikanie to zwiększa się w czasie narastania słabo ochronnej warstewki powierzchniowej. Wnikanie wodoru przy polaryzacji anodowej wytłumaczono zakwaszaniem roztworu przy elektrodzie w następstwie anodowego utleniania żelaza do Fe(II) lub Fe(III) i hydrolizy powstających produktów. Z kolei, podczas katodowej polaryzacji żelaza z produktami anodowego utleniania występuje pik zwiększonego wnikania wodoru przy potencjale redukcji magnetytu, co również wytłumaczono zakwaszeniem roztworu. Wpływ słabo ochronnych warstw powierzchniowych może być związany z hamowaniem dyfuzji  $\text{H}^+$  i  $\text{OH}^-$  od i do powierzchni. Wyrażono przypuszczenie, że związki Fe(II) lub  $\text{FeOH}_{\text{ads}}$  oddziałują katalitycznie na reakcję wydzielania wodoru w alkalicznych roztworach.

Najważniejsze publikacje: I. Flis-Kabulska: *Hydrogen entry into iron after potential jumps from cathodic to anodic polarization in 0.1M NaOH without and with EDTA or sodium molybdate*, *Electrochim. Acta* 2010, 55, 1912-1918.

I. Flis-Kabulska: *Effect of anodic prepolarization on hydrogen entry into iron at cathodic potentials in 0.1M NaOH without and with EDTA or sodium molybdate*, *Electrochim. Acta* 2010, 55, 4895-4901.

## 19. Charakterystyka procesów fizykochemicznych zachodzących w obszarze kilku warstw atomowych przy powierzchni ciał stałych (prof. Aleksander Jabłoński)

a) Realizowano prace teoretyczne związane z modyfikacją formalizmu matematycznego spektroskopii fotoelektronów XPS i spektroskopii elektronów Augera. Stworzony został nowy model obliczeniowy umożliwiający wyznaczanie parametrów uwzględniających efekty zderzeń elastycznych fotoelektronów w obszarze powierzchniowym ciał stałych. Zaproponowano uniwersalne wyrażenia analityczne opisujące te poprawki, które są łatwe w zastosowaniach i równocześnie bardzo dokładne. Opublikowano szczegółową analizę dokładności zaproponowanych poprawek.

Rozbudowano opracowany wcześniej pakiet programowy MULTILINE, stosowany do obliczeń związanych z analizą ilościowej XPS, wprowadzając nową funkcję wyznaczania czynników poprawkowych. Dokładność analizy testowano na przykładzie stopy jubilerskiego AuAgCu. W obliczeniach uwzględniano wszystkie linie fotoelektronów widoczne w widmie. Wiele uwagi poświęcono wyznaczaniu tzw. czynnika wstecznego rozpraszania stosowanego w ilościowej spektroskopii elektronów Augera. Organizacji ISO zaproponowano wprowadzenie nowej definicji opisującej ten parametr, a także zaproponowano nowy model teoretyczny umożliwiający obliczanie tego parametru dla dowolnego kąta bryłowego analizatora (ten efekt był wcześniej pomijany). Nowy model teoretyczny będzie podstawą bazy danych opracowywanej na zaproszenie NIST (zakończenie tych prac jest przewidywane w połowie 2011 r.

Najważniejsza publikacja *Dependence of the AES backscattering correction factor on the experimental configuration*, A. Jablonski and C. J. Powell, *Surface Sci.* 1928-1939 (2010).

b) Badano oddziaływanie gazów reaktywnych:  $\text{H}_2$ , CO z powierzchnią katalizatorów Au/CeO<sub>2</sub>, domieszkowanych samarem. Adsorpcja każdego z gazów ( $\text{H}_2$  i CO), ich koadsorpcja oraz reakcje prowadzone były w komorze preparacyjnej spektrometru. Po wstępnej redukcji wodorem, próbki były eksponowane na działanie poszczególnych gazów oraz ich mieszanin w różnych temperaturach. Analizę powierzchni próbek prowadzono metodą XPS, bezpośrednio po oddziaływaniu z gazami, bez kontaktu próbki z powietrzem atmosferycznym. Wyniki badań pokazują współlistnienie złota w stanie metalicznym ( $\text{Au}^0$ ) oraz elektrododatnim ( $\text{Au}^{\delta+}$ ) i elektroujemnym ( $\text{Au}^{\delta-}$ ) po oddziaływaniu z wodorem w temperaturach 120°C i 200°C. Interakcja CO powoduje tworzenie jedynie elektrododatnich cząstek złota współlistniących z cząstkami metalicznymi złota.

Obserwacja ta pozwala przypuszczać, że w wyższych temperaturach wodór reaguje z powierzchnią nośnika tlenkowego tworząc powierzchniowe grupy –OH, indukujące ujemny ładunek nanocząstek złota.

Obserwowany wzrost udziału nanocząstek złota o charakterze metalicznym w badanych katalizatorach po interakcji z gazami w wyższych temperaturach może być wyjaśniony częściową aglomeracją wysoko zdyspergowanych cząstek  $Au^{\delta+}$ . Prowadzono prace nad otrzymywaniem modelowych układów katalitycznych przez napylenie cienkich warstw złota w komorze preparatywnej. Prowadząc napylenie na polikrystaliczny tlenek ceru określono warunki preparatyki (szybkość i czas osadzania) pozwalające uzyskać nanocząstki złota o parametrach analogicznych do otrzymywanych w tradycyjnych metodach syntezy katalizatorów  $Au/CeO_2$ .

Prowadzone są również prace nad otrzymaniem modelowych cienkich warstw  $Al_2O_3$  oraz  $TiO_2$ .

### c) Współpraca z NIST\_USA

Poddano bardzo obszernej analizie typowe ilościowe zastosowania spektroskopii elektronowych: określanie składu warstwy powierzchniowej, wyznaczanie grubości warstw w zakresie nanometrów oraz pomiary wglębnych profili stężenia. Wskazano, że oszacowanie grubości warstwy ciała stałego podlegającej analizie za pomocą spektroskopii elektronowych jest problemem niebanalnym. Jest to związane z faktem, iż trajektorie elektronów w obszarze powierzchniowym nie są liniowe. W istocie, elektrony przemieszczają się wzdłuż trajektorii przypominających ruchy Browna.

W konsekwencji właściwym parametrem do oceny warstwy analizowanej jest funkcja będąca gęstością prawdopodobieństwa, że analizowany elektron był emitowany na danej głębokości. W ogólności ta funkcja może mieć bardzo skomplikowany kształt. W praktycznych zastosowaniach można się posługiwać wartością oczekiwaną tej funkcji.

Najważniejsza publikacja: *Progress in quantitative surface analysis by X-ray photoelectron spectroscopy*, C. J. Powell and A. Jablonski, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 178-179, 331-346 (2010).

## 20. Wysokorozdzielcza (SAM, AES, SEM) i elektro-chemiczna charakterystyka materiałów funkcjonalnych i konstrukcyjnych (prof. Maria Janik-Czachor)

Organizacja 10-tego jubileuszowego Sympozjum - 10<sup>th</sup> International Symposium on Electrochemical/Chemical Reactivity of Metastable Materials "Chemistry for Materials Science". Są to cykliczne Sympozja na których prezentowane są prace dotyczące zagadnień z zakresu szeroko pojętej fizykochemii powierzchni materiałów. W 10-tym Sympozjum uczestniczyło 46 osób, w tym wybitni przedstawiciele współczesnej nauki jak: prof. Koji Hashimoto (Japonia, odznaczony medalem 40-lecia IChF PAN), prof. Patrik Schmuki (Niemcy, wiceprzewodniczący Sekcji 4 ISE), prof. Hiroki Habazaki (Japonia), prof. Paweł Kulesza (Polska, Dziekan Wydziału Chemii UW), prof. Achim W. Hassel (Austria), prof. Arpad Molnar (Węgry, odznaczony medalem 40-lecia IChF PAN), prof. Mohamed Jouni (Francja). Pracownicy LSFM przedstawili swoje najważniejsze osiągnięcia w 3 wykładach, które są obecnie przygotowywane do druku w wydaniu specjalnym czasopisma *Applied Surface Science*. Prof. Maria Janik-Czachor jest „Guest-Editor” tego wydania.

## 21. Badanie oddziaływań międzycząsteczkowych metodami spektroskopowymi i mikroskopią STM/AFM (dr hab. Robert Nowakowski)

W 2010 r kontynuowaliśmy badania zjawisk powierzchniowych i objętościowych towarzyszących tworzeniu i rozkładowi wodorków w cienkich warstwach metali ziem rzadkich RE (takich jak: gadolin, terb, europ). Procesowi tworzenia wodorków tych metali towarzyszy interesująca przemiana metalu w izolator (lub półprzewodnik) ze zmianą szeregu właściwości, w tym optycznych. Zjawisko to (switchable mirror) mogące przebiegać w sposób odwracalny umożliwia szerokie zastosowania tak w pracach badawczych jak i w nowych urządzeniach elektro-optycznych. Osiągnięciem tego roku w tych badaniach było rozszerzenie użytych technik badawczych na obserwacje mikroskopowe warstw metali podczas reakcji z wodorem. Przygotowano cienkie warstwy metali RE przykryte częściowo nieciągłą warstwą palladu. Warstwy takie, po wstępnym utlenieniu

niepokrytej powierzchni RE, umożliwiając prowadzenie obserwacji dyfuzji wodoru w RE z miejsc przykrytych palladem. Korelacja obserwacji optycznej propagującego frontu w świetle monochromatycznym o różnej długości fali z uzyskanymi wcześniej widmami transparenacji wodorków o różnej stechiometrii umożliwiła analizę rozkładu faz wodorkowych w warstwie w kierunku propagacji (rysunek a). Zastosowanie mikroskopii AFM w warunkach *in situ* dostarczyło dodatkowych informacji. Przeprowadzono precyzyjną obserwację przemieszczającego się frontu w rozdzielczości porównywalnej z wielkością ziaren warstwy. Oczywistym jest, iż AFM nie rejestrował zmian właściwości optycznych warstwy, ale front wodorku był w tej metodzie widoczny topograficznie jako uskok o wysokości pojedynczych nm powstały na skutek powiększenia objętości wodorku względem czystego metalu. Na podstawie sekwencji zdjęć możliwym więc było dokładne oszacowanie szybkości propagacji (rysunek b). Zbadano wpływ zewnętrznego pola elektrycznego na tą szybkość, co umożliwiło m.in. analizę ładunku elektrycznego absorbatu wodorowego w badanych metalach.

Tranzystory typu p wytwarzane z pochodnych politiofenów są badane od ponad 10 lat. Znacznie mniej prac poświęcono tranzystorom typu n ponieważ półprzewodniki organiczne o tego typu przewodnictwie są chemicznie mniej trwałe niż ich odpowiedniki typu p. Ostatnio wykazano, że niektóre diimidy aromatyczne zastosowane w tranzystorze typu n łączą dużą ruchliwość nośników ładunku z trwałością. Użyliśmy skaningowego mikroskopu tunelowego do obserwacji samoorganizacji cząsteczek nowych diimidowych pochodnych perylenu na dwóch podłożach: HOPG i zrekonstruowanej powierzchni Au(111). Badania prowadzono w rozdzielczości subcząsteczkowej w roztworze. Warunki te umożliwiły prowadzenie obserwacji w warunkach *in situ* w trakcie nanoszenia i rozpuszczania warstw organicznych w zależności od stężenia pochodnych perylenu w roztworze. Ponieważ cząsteczka nie jest płaska zaobserwowaliśmy dwie struktury charakteryzujące się inną orientacją przestrzenną cząsteczki na podłożu (porównaj dwie struktury otrzymane na HOPG). Powyższa zmiana orientacji cząsteczki (obróć płaszczyzny rdzenia perylenu względem podłoża) jest wywoływana zwiększeniem ilości adsorbentu i reorganizacją struktury na bardziej upakowaną.

Najważniejsza publikacja: T.Jaroch, R.Nowakowski, M.Zagórska, A.Proń, „Two-Dimensional Supramolecular Organization in Oligomers of Dialkylterthiophenes – Effect of the Alkyl Substituent Position” *J. Phys. Chem. C* (2010) 114, 13967-13974 (wyróżnienie prezentacji na konferencji E-MRS (European Materials Research Society) Fall Meeting 2010)

M.Knor, R.Nowakowski, E.Nowicka, R.Duś, „Surface-Mediated Thin Hydride Film Formation” *Langmuir* (2010) 26(5) 3302-3307; M.Knor, R.Nowakowski, R.Duś, „Surface and Bulk Phenomena in the Process of Hydride Formation in Thin Films of Rare Earth Metals. Comparison between Terbium and Europium” wysłane do *Applied Surface Science*

## 22. Rozwój teorii cieczy w zastosowaniu do predykcji równowag fazowych i tworzenia baz danych rekomendowanych (dr hab. Marian Góral)

W ramach naszego długoletniego planu badawczego został rozwiązany kolejny problem w obszarze wzajemnej rozpuszczalności związków organicznych i wody. Opracowano model roztworu typu ester+woda i zastosowano go do ewaluacji istniejących danych doświadczalnych w celu wyselekcjonowania tzw. danych rekomendowanych. Analizę istniejących danych rozpuszczalności i metody obliczeń opisano w trzech artykułach opublikowanych w roku 2010 w *Journal of Physical and Chemical Reference Data* (JPCRD). Artykuły wchodziły w skład serii wydawanej pod patronatem National Institute of Standards and Technology (USA). Wzbudziły duże zainteresowanie i zostały wymienione na stronie internetowej JPCRD w dziale „Top 20 Most Downloaded Articles”. Te i inne zależności termodynamiczne otrzymane z danych rozpuszczalności dla różnych estrów zostały przeanalizowane i uogólnione co pozwala przy pomocy niedużej liczby uzasadnionych fizycznie stałych reprodukować istniejące dane a także przewidywać krzywe rozpuszczalności w układach dotychczas niemierzonych. W ten sposób zwielokrotniono istniejące dane rozpuszczalności w układach ester + woda i umożliwiono obliczenia w układach wieloskładnikowych. Do tej pory obliczenia opisane w literaturze i uwzględniające asocjacje w roztworach wodnych dawały zbyt niedokładne wyniki.

## 23. Elektrody modyfikowane o potencjalnym zastosowaniu w czujnikach i ogniwach (prof. Marcin Opallo)

Elektrody węglowe używane są od dziesiątków lat. Niektóre ich zastosowania np. w czujnikach elektrochemicznych wymagają otrzymania cienkiej warstwy materiału węglowego naniesionego na powierzchnię przewodzącą. Istnieje wiele metod przygotowania takich warstw np. piroliza, napylenie, CVD lub drukowanie i

prawie wszystkie wymagają zastosowania specjalistycznego, często wymagającego warunków próżniowych, sprzętu. Nasza metoda jest bardzo prosta i polega na naprzemiennym zanurzeniu, na ok. 1 s, przewodzącej płytki szklanej pokrytej tlenkiem indu domieszkowanego cyną do zawiesiny dodatnio i ujemnie naładowanych nanocząstek węgla o średnicy ok. 8 nm. Są one odpowiednio zmodyfikowane grupami fenylosulfonowymi i amoniowymi. Już jedna sekwencja wystarcza do pokrycia powierzchni materiałem węglowym, a kilkukrotne powtórzenie tej procedury powoduje wielokrotne zwiększenie powierzchni elektroaktywnej co zaobserwowano w przypadku redukcji wody utlenionej. Jej zwiększenie skutkuje adsorpcją znacznej ilości elektroaktywnych jonów np. 2,2'-azyno-bis(3-etylobenzotiazolino-6-sulfonianu lub enzymów np. oksydazy bilirubiny lub mioglobiny. Dzięki nim elektroda zyskuje właściwości bioelektrokatalityczne w stosunku do tlenu czy wody utlenionej. Zaproponowana metoda jest bardzo rzadko stosowanym wariantem osadzania nanocząstek metodą warstwa po warstwie (ang layer by layer) bez wykorzystania polimerów lub jonów organicznych jako łączników. W tym przypadku łącznikiem jest nanocząstka o przeciwnym ładunku elektrycznym.

Najważniejsza publikacja: Szot K., Watkins J.D., Bull, S.D., Marken F., Opallo M., Three dimensional film electrode prepared from oppositely charged carbon nanoparticles as efficient enzyme host. *Electrochemistry Communications* 2010, 12, 737-739

## 24. Zjawiska złożone, procesy nierównowagowe i przetwarzanie informacji przy wykorzystaniu reakcji chemicznych (prof. Jerzy Górecki)

Wydaje się, że najważniejszym osiągnięciem naukowym zespołu jest opanowanie technik eksperymentalnych pozwalających na badanie kropli roztworu reagentów reakcji Bielousowa-Zabotyńskiego otoczonych węglowodorami. Zespół od dłuższego czasu zajmuje się strategią przetwarzania informacji przez medium chemiczne. Nasze poprzednie prace dotyczyły medium pobudliwego, w którym stopień pobudliwości jest kontrolowany natężeniem oświetlenia. Przy wykorzystaniu tego medium można zrealizować wiele typów przetwarzania informacji kodowanej w pulsach pobudzenia. Jednakże zastosowanie takiego medium wymagało czynnika ludzkiego – tj. obecności badacza, który ustali odpowiednie lokalne oświetlenie medium. Nasuwa się zatem pytanie: czy przy określonych nierównowagowych więzach układ chemiczny może samorzutnie - na drodze samoorganizacji - utworzyć struktury interesujące dla przetwarzania informacji? Potencjalnym kandydatem są układy wielofazowe, złożone z fazy w której zachodzą reakcje i niemieszającej się z nią fazy inertej. Wspólnie z partnerami z projektu NEUNEU rozpoczęliśmy badania nad kroplami roztworu reagentów reakcji Bielousowa-Zabotyńskiego stabilizowanych warstwą lipidową i otoczonych roztworem węglowodorów. Zbadano wiele różnych lipidów i węglowodorów pod kątem jak największej stabilności otrzymywanych struktur. Udało się nam tak dobrać warunki eksperymentu, aby krople pozostawały stabilne przez czas przekraczający godziny, co wydaje się wystarczająco długim czasem do obserwacji interesujących nas zjawisk.. Przeprowadziliśmy serie eksperymentów dla różnych stężeń reagentów reakcji Bielousowa-Zabotyńskiego i dobraliśmy parametry modelu reakcji. Opracowany model posłużył do numerycznego opisu oddziaływania pobudzeń w kroplach, czyli procesu odpowiedzialnego za wymianę informacji.

## 25. Astrochemia laboratoryjna: Fotochemia, astrochemia oraz spektroskopia oscylacyjna i elektronowa cząsteczek z rodziny cyjanoacetylenów (dr hab. Robert Kołos)

Wykonano szczegółową analizę spektroskopii elektronowej cząsteczki cyjanodiacetyleny (H-CC-CC-CN) w fazie gazowej oraz w zestalonym argonie, kryptonie i ksenonie. Nasze laboratorium jest obecnie jednym z kilku na świecie dysponujących makroskopowymi ilościami tego egzotycznego związku, ważnego dla astrochemii. Widmo absorpcji w zakresie 200 – 315 nm ujawniło dobrze rozdzieloną progresję wibronową. Są to przejścia zabronione z uwagi na symetrię orbitalną, jednak mogą być obserwowane dzięki sprzężeniom wibronowym (angażującym drgania zginające). Dokonaliśmy pełnej identyfikacji 34 wykrytych pasm wibronowych. Porównanie widm w fazie gazowej z tymi zmierzonymi w zestalonych gazach szlachetnych (z wykorzystaniem techniki kriogenicznej) pozwoliło z jednej strony na identyfikację tzw. pasm gorących, z drugiej zaś – na odkrycie przejść do pierwszego wzbudzonego stanu singletowego. Identyfikacje spektralne były możliwe dzięki obliczeniom częstotliwości oscylacyjnych na poziomie teorii funkcjonalu gęstości (DFT), obejmującym zarówno stan podstawowy jak i oba wbudzone stany singletowe. Kolejnym odkryciem było stwierdzenie, że cyjanodiacetylen wykazuje w warunkach kriogenicznych silną luminescencję. Emisja ta została zidentyfikowana jako fosforescencja, na podstawie zmierzonego długiego czasu zaniku (ok. 200 ms). Niezależnie, nasze obliczenia

DFT potwierdziły tezę, że obserwowane są tu przejścia z

najniższego stanu trypletowego. Dokonałiśmy pełnej identyfikacji ok. 50 znalezionych pasm wibronowych, czego wynikiem jest pierwszy bezpośredni pomiar jednego z niskoczęstotliwościowych drgań zginających podstawowego stanu elektronowego cyjanodiacytenu, istotny m.in. dla jego detekcji astronomicznej. Odkrycie zostało dokonane na podstawie danych astrospektroskopowych z widzialnego zakresu widma, zebranych z użyciem trzech wysokiej klasy instrumentów, w tym spektrometru UVES współpracującego z 8-metrowym teleskopem Paranal Obserwatory (Chile). Analizowano ekstynkcję światła gwiazd przez ośrodek międzygwiazdowy w 11 całkowicie odmiennych kierunkach obserwacji. Średnie widmo uzyskane z tych pomiarów ujawniło obecność nieznanej uprzednio cechy spektralnej, należącej do zbioru tzw. rozmytych pasm międzygwiazdowych (DIB). Zidentyfikowaliśmy to pasmo jako należące do kationu dwuacetyleny - na podstawie porównania z widmem laboratoryjnym. Absorpcja przy 5068.8 Å ujawniła również swoją obecność w dwóch pojedynczych kierunkach obserwacji, skądinąd znanych ze szczególnie dużej obfitości molekuł węglowych, C<sub>2</sub> i C<sub>3</sub>. Bardzo rozrzedzony ośrodek międzygwiazdowy, częściowo przezroczysty dla światła gwiazd, znany był do tej pory z obecności cząsteczek co najwyżej 3-atomowych. Odkrycie zmusza do rewizji poglądów na procesy chemiczne zachodzące w takim środowisku, a zarazem stanowi pierwszą identyfikację dotychczas niewyjaśnionych pasm DIB.

Najważniejsze publikacje: M. Turowski, C. Crépin, M. Gronowski, J.-C. Guillemin, A. Coupeaud, I. Couturier-Tamburelli, N. Piétri, and R. Kolos; "Electronic absorption and phosphorescence of cyanodiacylene", *J. Chem. Phys.*, 133, 074310 (2010).

J. Krelowski, Y. Byaletsky, G.A. Galazutdinov, R. Kolos, M. Gronowski, G. Lo Curto, „Evidence for diacetylene cation as the carrier of a diffuse interstellar band”, *Astrophysical Journal* 714 (2010) L6

## 26. Fotoelektronika Organiczna: Jedno- i wielordzeniowe kompleksy lantanowców jako emiterzy dla diagnostyki biomedycznej (prof. Marek Pietraszkiewicz)

Badania fotofizyki laktonów triarylometanowych o strukturze donorowo-akceptorowej i ich spirocyklicznych analogów strukturalnych zaowocowały odkryciem nowej klasy substancji chemicznych emitujących światło białe o widmie ciągłym. Jego źródłem są cząsteczki o strukturze laktonu fioletu krystalicznego (Crystal Violet Lactone, CVL), umożliwiające wbudowanie w cząsteczkę dwóch fluoroforów odpowiedzialnych za emisję promieniowania: jeden niebieskiego, drugi – pomarańczowego. Udział emisji każdego z nich w podwójnej fluorescencji CVL silnie zależy od otoczenia cząsteczki, które modyfikuje energie ich stanów wzbudzonych. Wiedza na temat fotofizyki tych układów, w tym zwłaszcza zależności energetyki stanów wzbudzonych od struktury cząsteczki pozwala przewidywać szerokość, kształt i inne parametry widma podwójnej fluorescencji, co umożliwi projektowanie białych fluoroforów pod kątem konkretnych potrzeb. Emisja światła białego przez tak proste układy molekularne jest pożądanym i poszukiwanym zjawiskiem, głównie ze względu na zastosowania w organicznych diodach luminescencyjnych OLED. Pomimo odkrycia niezwyklej właściwości CVL i jego analogów strukturalnych, ich ewentualne wykorzystanie jako emiterów światła białego wymaga optymalizacji relacji struktura-właściwości. Prace w tej dziedzinie trwają. Opracowano pomysłów metodę kotwiczenia elementów cieczy jonowych do powierzchni nanorurki węglowej. Metoda polega na reakcji terminalnego nitrenu jako czynnika elektrofilowego do nanorurki. Nitren powstaje w wyniku kontrolowanej termolizy azydku imidazoliowego. Zakotwiczony kation imidazoliowy jest zdolny do elektrostatycznego oddziaływania z ujemnie naładowanymi jonami fotoluminescencyjnych kompleksów lantanowcowych z 1,3-diketonami o stechiometrii Ln(L)<sub>4</sub><sup>-</sup>. Badania kompleksowania i fotoluminescencji były prowadzone we współpracy z partnerami projektu M. Curie ITN „FINELUMEN”: ISOF-CNR (Bologna, Włochy) i Namur University, Belgia.

Najważniejsza publikacje: Chem. Commun. *Electrostatically-Driven Assembly of MWCNTs with an Europium Complex* Laura Maggini, Hassan Traboulsi, K. Yoosaf, John Mohanraj, Johan Wouters, Oksana Pietraszkiewicz, Marek Pietraszkiewicz, Nicola Armaroli and Davide Bonifazi, *Chem. Commun.*, accepted. DOI: 10.1039/C0CC02874F. *Tunable white fluorescence from intramolecular exciplexes*, Authors: Karpiuk J., Karolak E., Nowacki J., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2010, 12, 8804-8809.

## 27. Ultraszybkie techniki laserowe: metody wytwarzania impulsów o dużych mocach szczytowych; pomiary kinetyczne o wysokiej czasowej zdolności rozdzielczej (prof. Czesław Radzewicz)

Uzyskaliśmy wzmacnianie fioletowych (ok. 400nm) impulsów femtosekundowych w kryształach b-boranu baru (BBO) z wykorzystaniem technologii parametrycznego wzmocnienia ze świergotem. Zbudowany przez nas wzmacniacz typu OPCPA zawiera streczer, wzmacniacz parametryczny oraz kompresor. Wieloprzejsciowy wzmacniacz parametryczny był pompowany 4-tą harmoniczną promieniowania lasera Nd:YAG (266nm, 8ns). Jako drugiej harmonicznej wiązki femtosekundowego oscylatora szafirowego. Aby zapewnić szerokopasmowe przetwarzanie impulsów zastosowaliśmy zmodyfikowaną metodę achromatycznej konwersji drugiej harmonicznej wykorzystującą dyspersję kątową wiązki fundamentalnej. W układzie tym udało się uzyskać 40% sprawność przetwarzania impulsów w nadfiolet przy zachowaniu widma o szerokości około 20nm wystarczającego do wytwarzania impulsów krótszych niż 20fs. Okazało się, że zaproponowany przez nas schemat bezpośredniego wzmacniania fioletowych impulsów femtosekundowych impulsy zasiewające do dużej mocy ma istotne zalety w porównaniu z wcześniejszymi rozwiązaniami i pozwala osiągnąć moce gigawatowe. Jednocześnie, nasze badania pokazały także, że OPCPA w fiolecie ma parametry istotnie gorsze niż jego odpowiednik w podczerwieni gdzie wcześniej udało się nam wytworzyć impulsy terawatowe. Ograniczenie wynikają głównie z absorpcji dwufotonowej promieniowania pompującego co nie tylko zmniejsza sprawność wzmacniacza ale także prowadzi do niekompensowalnych efektów termicznych w kryształach BBO.

Najważniejsza publikacja: "*High gain broadband amplification of ultraviolet pulses In optical parametric chirped pulse amplifier*", P. Wnuk, Y. Stepanenko, Cz. Radzewicz (w druku).

## 28. Fotoindukowane procesy przenoszenia ładunku: badania procesów przenoszenia elektronu i fototautomeryzacji w fazach skondensowanych i w warunkach izolacji w naddźwiękowych wiązkach molekularnych (prof. Jerzy Sepioł)

Wyjaśniono (wspólnie z J. Walukiem) mechanizm wygaszania fluorescencji w serii pirydyloindoli (2PyIn, 3-PyIn, 7PyIn), których topologia, w odróżnieniu od uprzednio badanego 2-(2'-pirydylo)indolu (2-2'PyIn), wyklucza: (i) możliwość tworzenia solwatów z wodą i alkoholami o stechiometrii 1:1 (lub 1:2) i strukturze cyklicznej, (ii) możliwość rotameryzacji z powstaniem dwóch form *syn* i *anti*. Okazało się, iż w rozpuszczalnikach protycznych fluorescencja tych cząsteczek jest wygaszana mimo braku „mostków rozpuszczalnikowych” łączących grupy donora (NH) i akceptora (N) protonu. Wygaszanie jest mniej efektywne, niż to obserwowane dla form *syn* cząsteczek mogących tworzyć cykliczne kompleksy z wodą lub alkoholami (np. 2-2'PyIn). Zarówno wyniki badań eksperymentalnych jak i wyniki obliczeń metodami teorii funkcjonału gęstości (DFT oraz TDDFT) wskazują, iż wygaszanie jest związane z przesunięciem protonu wiązania wodorowego między atomem azotu pirydynowego i protycznym „partnerem”. Jednak efektywna depopulacja stanu fluoryzującego wymaga więcej niż jednej cząsteczki wody lub alkoholu. Zaproponowano dwa alternatywne modele wyjaśniające zależną od rozpuszczalnika fotofizykę tych cząsteczek. Pierwszy z nich zakłada, iż w wyniku wzrostu gęstości elektronowej (i związanego z tym wzrostu zasadowości) na atomie azotu w pierścieniu pirydyny w stanie wzbudzonego elektronowo następuje przeniesienie protonu z cząsteczki wody lub alkoholu z utworzeniem kationu o nisko leżących stanach elektronowo wzbudzonych i wzajemnie prostopadłej geometrii obu części cząsteczki. Drugi model jest bardziej ogólny, ponieważ nie wymaga wzajemnej rotacji obu części chromoforu. Zakłada on, w czasie ruchu protonu między atomem tlenu cząsteczki wody lub alkoholu do atomu azotu pierścienia pirydyny, obniżenie energii stanu  $^1(n, p^*)$ , który się tworzy w wyniku przeniesienia elektronu z orbitalu wolnej pary elektronowej wody lub alkoholu na orbital zlokalizowany w pierścieniu pirydyny. Prowadzi to do „przecięcia stożkowego” z najniższym leżącym stanem elektronowo wzbudzonego  $S_1$  a dalszy ruch protonu sprowadza energię stanu  $^1(n, p^*)$  w pobliże energii stanu podstawowego  $S_0$ . Towarzyszy temu wydajny proces konwersji wewnętrznej do stanu podstawowego i powrotny ruch protonu. Sprawdzone zostało zastosowanie diheptylo-bipirydyliolu (DH-BP(OH)<sub>2</sub>) w luminescencyjnych koncentratorach słonecznych (Luminescent Solar Concentrators, LSC). Cząsteczka ta jest pochodną [2,2'-bipirydylo]-3,3'-diolu (BP(OH)<sub>2</sub>), „sztandarowej” cząsteczki wykazującej fotoindukowane wewnątrz-cząsteczkowe przeniesienie protonu (ESIPT), i podobnie jak związek macierzysty charakteryzuje się wydajną fluorescencją z produktu reakcji o dużym przesunięciu Stokes'a. Wstępne badania są obiecujące. Wprowadzenie tej cząsteczki wraz z

nanocząstkami srebra do cienkiej błony z polivinylobutyralu (PVB) zaowocowało zwiększeniem wydajności emisji o ok. 30%.

Najważniejsze publikacje: Photochemical & Photobiological Sciences (V. Vetokhina, M. Kijak, G. Wiosna Salyga, R. P. Thummel, J. Herbich, J. Waluk, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2010, 9, 923-930). T. Saraidarov, V. Levchenko, A. Grabowska, P. Borowicz, R. Reisfeld, *Chem. Phys. Lett.*, 2010, 492, 60-62

### 29. Fotofizyka i spektroskopia układów fotoaktywnych: struktura i reaktywność układów z wiązaniami wodorowymi (prof. Jacek Waluk)

Zaproponowano model procesów tautomeryzacji i depopulacji stanów wzbudzonych *mezo*-podstawionych porfircenów. Model ten wyjaśnia niecodzienny, wykryty przez nas efekt: wewnątrzcząsteczkowe przenoszenie dwóch atomów wodoru (konwersja *trans-trans*) zachodzi szybciej niż migracja pojedynczego atomu (konwersja *cis-trans*). Jest to konsekwencją sprzężenia współrzędnej reakcji z ruchem torsyjnym podstawników alkilowych w pozycjach *mezo*. Sprzężenie to jest istotne w przypadku przenoszenia pojedynczego atomu, a mniej ważne dla transportu dwóch atomów. Wyniki te dostarczają istotnego argumentu na rzecz dominacji tunelowania w procesie tautomeryzacji, nawet w roztworach w temperaturze pokojowej: efektywna masa jest bowiem mniejsza dla ścieżki reakcji angażującej dwa atomy. Wykryto nieobserwowane dotąd w porfircenach rzadkie struktury tautomeryczne typu *cis*. Wyniki stacjonarnych i czasowo-rozdzielczych eksperymentów pozwoliły zrozumieć mechanizmy dezaktywacji stanów wzbudzonych porfircenów i zależność stałych szybkości od lepkości. Uzyskane rezultaty dobrze rokują dla przyszłych badań, w których planujemy użycie porfircenów jako sond nanolepkości, również w układach biologicznych. Badania fotofizyki serii izomerycznych pirydyloindoli zaowocowały sformulowaniem modeli tłumaczących mechanizmy wygaszania fluorescencji tego typu związków przez protyczne rozpuszczalniki. Efektywna dezaktywacja stanu wzbudzonego jest wynikiem sprzężenia procesów będących konsekwencją zmiany struktury elektronowej, a co za tym idzie, własności kwasowo-zasadowych w stanie wzbudzonym: przenoszenia elektronu, przenoszenia protonu oraz skręcania części cząsteczki, zachodzącego po wzbudzeniu.

Najważniejsza publikacja: On the origin of fluorescence quenching of pyridylindoles by hydroxylic solvents; Vetokhina, V., Kijak, M., Wiosna-Salyga, G., Thummel, R. P., Herbich, J., Waluk, J.; *Photochem. Photobiol. Sci.* 9, 923-930 (2010) (artykuł na zaproszenie, w specjalnym numerze poświęconym J. Verhoevenowi). *Unusual, solvent viscosity-controlled tautomerism and photophysics: meso-alkylated porphycenes*; Gil, M., Dobkowski, J., Wiosna-Salyga, G., Urbańska, N., Fita, P., Radzewicz, C., Pietraszkiewicz, M., Borowicz, P., Marks, D., Glasbeek, M., Waluk, J.; *J. Am. Chem. Soc.* 132, 13472-13485 (2010).

### 30. Konwersja energii w procesach przeniesienia ładunku (prof. Andrzej Kapturkiewicz)

W trakcie badania procesów wygaszania stanów wzbudzonych typu  $^3\text{MLCT}$  na drodze przeniesienia energii wykonano pomiary efektywności wygaszania dla serii układów w których donorem energii były silnie luminozujące kompleksy irydu(III) a akceptorami węglowodory aromatyczne takie jak naftalen czy acenaften. Badane układy zostały tak dobrane aby wykluczyć udział procesów wygaszania zachodzących z przeniesieniem ładunku. W przypadkach gdy energia swobodna reakcji  $^3\text{MLCT} + \text{Q} \rightarrow \text{MLCT} + ^3\text{Q}$  była zbliżona do zera zaobserwowano oczekiwaną zmianę charakteru zaników emisji zachodzącej ze stanu wzbudzonego  $^3\text{MLCT}$  z mono-eksponencjalnej na bi-eksponencjalną, potwierdzając jednocześnie możliwość pełnego kinetycznego opisu zachodzącego procesu przeniesienia energii z wyznaczeniem obu stałych kinetycznych charakteryzujących oba równoległe zachodzące procesy. Analiza bi-eksponencjalnych profili zaniku pozwala na proste wyznaczenie zarówno obu stałych szybkości jak i oszacowanie obu czasów życia charakteryzujących oba stany wzbudzone biorące udział w badanym procesie przeniesienia energii. Możliwe to jest przy wykorzystaniu wyprowadzonych przez nas (w oparciu o tzw. formalizm Birksa) zależności.

Opracowana przez nas procedura pozwalając na wyznaczenie obu stałych szybkości prowadzi do znacznie lepszego kinetycznego opisu zachodzącego procesu przeniesienia energii. Jej dodatkowymi zaletami są możliwość wyznaczenia w dość prosty zarówno czasu życia nie-emitującego stanu wzbudzonego  $^3\text{A}$  jak i jego energii  $E_{\text{A}}$ . Ponieważ testowane w naszej pracy luminozujące kompleksy irydu(III) charakteryzują się

strukturowanymi widmami to emisji niezbędny w takich obliczeniach parametr  $E_D$  jest łatwo dostępny z wartości przejścia 0-0. Ze względu na to, że w zależności od rodzaju ligandów związanych z jonem  $\text{Ir}^{3+}$  w badanych kompleksach ich energia może być w dowolny sposób zmieniana w zakresie co najmniej 2-3 eV opracowana przez nas metodyka pozwala na wyznaczanie energii jak i czasów życia szerokiej gamy nie-emitujących stanów wzbudzonych, będąc w tym ostatnim przypadku alternatywą dla znacznie trudniejszych pomiarów metodami absorpcji przejściowej. Metodyczny aspekt naszych badań został opisany w pracy pt. "Time-resolved Luminescence Investigations of the Reversible Energy Transfer from the Excited  $3^*MLCT$  States to Organic Acceptors – an Alternative Method for the Determination of Triplet State Energies and Lifetimes" wysłanej do druku w J. Photochem. Photobiol. A. Proponowana metodyka może być też użyta do wyznaczania energii emitujących związków nieorganicznych (kompleksowych) charakteryzujących się najczęściej brakiem struktury w ich widmach emisyjnych. W przypadku silnie egzotermicznych dwucząsteczkowych procesów fotoindukowanego przeniesienia ładunku kinetyka tych procesów jest kontrolowana szybkością dyfuzji i na ogół opisywana równaniem Smoluchowskiego-Einsteina. Oznacza to, że pomiary stałych szybkości większych niż limit dyfuzyjny w badanych układzie są możliwe (przynajmniej teoretycznie) w przypadku zastosowania ultra-krótkich impulsów wzbudzających. Obserwacje szybkości wygaszania emisji (o ile są one wykonane w wystarczająco krótkiej domenie czasowej) powinny więc umożliwić wyznaczanie szybkości elementarnego aktu przeniesienia elektronu pomiędzy reagentami \*D oraz A. W ramach nieformalnej współpracy z ośrodkami w Grazu oraz Genewie sprawdzono tę hipotezę wykorzystując ultraszybką (w domenie sub-pikosekundowej) laserową spektroskopię emisyjną, używając jako układu modelowego pary 2,5-dicyjano-N,N,N',N'-tetrametylo-p-fenylendiamina (odpowiednio donator) + 1,3-dimetylo-2-nitrobenzen (akceptor elektronu). W ramach wykonanych badań potwierdzono możliwość pominięcia ograniczeń dyfuzyjnych poprzez zastosowanie krótkich impulsów wzbudzających, otwierając jednocześnie możliwość wyjaśnienia tzw. paradoksu Rehma-Wellera.

Najważniejsza publikacja: Chem. Eur. J. 2010, 16, 2291-2299

**Obszerny opis wszystkich zrealizowanych zadań badawczych objętych planem zadaniowo - finansowym w 2010 roku został umieszczony w załączniku do niniejszego wniosku**

2. Informacja o upowszechnianiu i popularyzacji wyników działalności jednostki naukowej, ze szczególnym uwzględnieniem publikacji międzynarodowych.

W sumie opublikowaliśmy 215 prac w tym 175 w czasopiśmie z listy filadelfijskiej.

Najważniejsze publikacje IChF PAN w 2010 z podanym IF:

Lp.	Czasopismo	Tytuł	Autorzy	Rok, tom, strony	Zespół	IF
1	Angew. Chem. Int. Ed	Graphite and Nanocrystalline diamond	Lewiński J., Kaczorowski T., Prochowicz D., Lipińska T., Justyniak I., Kaszkur Z., Lipkowski J.	2010, 49, 7035-7039.	2/8, 2/9, 5/16	11,829
2	Angew. Chem. Int. Ed	Solid-state conversion of the solvated dimer [ {tBuZn(m-OtBu)(thf)} <sub>2</sub> ] into a long overlooked trimeric [ {tBuZnOtBu} <sub>3</sub> ] species	Lewiński J., Dutkiewicz M., Lesiuk M., Śliwiński W., Zelga K., Justyniak I., Lipkowski J.	2010, 49, 8266–8269.	2/8, 2/9	11,829



3	Blood	Bortezomib modulates surface CD20 in B-cell malignancies and affects rituximab-mediated complement-dependent cytotoxicity.	Bil J., Winiarska M., Nowis D., Bojarczuk K., Dąbrowska-Iwanicka A., Basak G.W., Sułek K., Jakobisiak M., Gołąb J.	2010, 115, 3745-3755	3/10	<b>10,555</b>
4	Proceedings of National Academy of Sciences	Bimodal gene expression in noncooperative regulatory systems	Ochab-Marcinek A., Tabaka M.	2010, 107, 22096-22101	3/10	<b>9,432</b>
5	J. Am. Chem. Soc.	Unusual, Solvent Viscosity-Controlled Tautomerism and Photophysics: Meso-Alkylated Porphycenes	Michał Gil, Jacek Dobkowski, Gabriela Wiosna-Sałyga, Natalia Urbańska, Piotr Fita, Czesław Radzewicz, Marek Pietraszkiewicz, Paweł Borowicz, David Marks, Max Glasbeek, Jacek Waluk*	2010, 132, 13472-13485	9/26, 9/27, 9/28, 9/29	<b>8,580</b>
6	J. Am. Chem. Soc.	“Sequence-Specific Ni(II)-Dependent Peptide Bond Hydrolysis for Protein Engineering. Combinatorial Library Determination of Optimal Sequences”	A.Krezel, E.Kopera, A.M.Protas, .Poznanski, A.Wyslouch-Cieszynska, W.Bal	2010, 132, 3355-3366	2/7	<b>8,580</b>
7	Astrophysical Journal	Evidence for diacetylene cation as the carrier of a diffuse interstellar band	J. Krełowski, Y. Byaletsky, G.A. Galazutdinov, R. KOŁOS, M. GRONOWSKI, G. Lo Curto	2010, 714, L64-L67	9/25	<b>7,364</b>
8	Physical Review Letters	Casimir Interactions in Ising Strips with Boundary Fields: Exact Results.	Douglas B. Abraham., Maciołek A.	2010, 105, 055701-1-4	3/10	<b>7,328</b>
9	Autophagy	Proteolytic pathways involved in modulation of CD20 levels	Winiarska M, Bil J, Nowis D, Golab J.	2010, 6 810-812	3/10	<b>6,829</b>
10	Lab Chip	Bonding of microfluidic devices fabricated in polycarbonate	D. Ogonczyk, J. Wegrzyn, P. Jankowski, B. Dabrowski and P. Garstecki	2010, 10, 1324–1327	3/11	<b>6,306</b>

11	Lab Chip	Droplet on demand system utilizing a computer controlled microvalve integrated into a stiff polymeric microfluidic device	Krzysztof Churski, Jacek Michalski and Piotr Garstecki	2010, 10, 512–518	3/11	<b>6,306</b>
12	Lab Chip	Dynamic memory in a microfluidic system of droplets traveling through a simple network of microchannels	Olgierd Cybulski and Piotr Garstecki	2010, 10, 484–493	3/11	<b>6,306</b>
13	Lab Chip	High-throughput automated droplet microfluidic system for screening of reaction conditions	Krzysztof Churski, Piotr Korczyk and Piotr Garstecki	2010, 10, 816–818	3/11	<b>6,306</b>
14	Am J Pathol	Cardiotoxicity of the anticancer therapeutic agent bortezomib	Nowis D, Mączewski M, Mackiewicz U, Kujawa M, Ratajska A, Wieckowski M, Wilczyński GM, Malinowska M, Bil J, Salwa P, Bugajski M, Wójcik C, Siński M, Abramczyk P, Winiarska M, Dąbrowska-Iwanickab A, Duszyński J, Jakóbisiak M, Gołab J.	2010, 176, 2658-2668	3/10	<b>5,673</b>
15	Chem. Commun.	Reversible aggregation of X-shaped bolaamphiphiles with partially fluorinated lateral chains at the air/water interface	P. Nitoń, A. Żywociński, R. Hołyst, R. Kieffer, C. Tschierske, J. Paczesny, D. Pocięcha, E. Górecka	46, 1896-1898 (2010)	3/10, 3/12	<b>5,504</b>
16	Biosens. Bioelectron.	Molecularly imprinted polymer (MIP) based piezoelectric microgravimetry chemosensor for selective determination of adenine".	Pietrzyk A., Suriyanarayanan S., Kutner W., Chitta R., Zandler M. E., D'Souza F.	2010, 25, 2522-2529.	2/2	<b>5,429</b>
17	Chem. Eur. J.	Symmetrization of Cationic Hydrogen Bridges of Protonated Sponges Induced by Solvent and Counteranion Interactions as Revealed by NMR Spectroscopy	Pietrzak M, Wehling JP, Kong S, Tolstoy PM, Shenderovich IG, Lopez C, Claramunt RM, Elguero J, Denisov GS, Limbach HH	2010, 16, 1679-1690	2/6	<b>5,382</b>

18	Chem. Eur. J.	On the Coherent Description of Diffusion-Influenced Fluorescence Quenching Experiments II: Early Events.	Angulo G., Kattinig D.R., Rosspeintner A., Grampp G., Vauthey E.	2010, 16, 2291-2299	9/30	<b>5,382</b>
19	Applied Catalysis B: Environmental	Hydrodechlorination of tetrachloromethane on alumina- and silica-supported platinum catalysts	M. Bonarowska, Z. Kaszukur, L. Kępiński, Z. Karpiński	2010, 99, 248-256	5/15, 5/16	<b>5,252</b>
20	Anal. Chem.	Evaluation of Ligand-Selector Interaction from Effective Diffusion Coefficient	Bielejewska A., Bylina A., Duszczyk K., Fialkowski M., Hołyst R.	2010, 82, 5463-5469.	2/8, 3/10, 3/12	<b>5,214</b>
21	Anal. Chem.	Label-Free Detection of Lectins on Carbohydrate-Modified Boron-Doped Diamond Surfaces	Szunerits S., Niedziółka-Jonsson J., Boukherroub R., Woisel P., Baumann J.S., Siriwardena A.	2010, 82, 8203-8210	7/23	<b>5,214</b>

W 2010 roku dokonaliśmy 25 zgłoszeń patentowych w tym dwóch zagranicznych oraz uzyskaliśmy jeden patent za zgłoszenie z 2008 roku (w ramach działalności wdrożenia i patenty):

L.P.	Tytuł	Twórca/twórcy (nazwisko i imię)	Data zgłoszenia patentowego	Numer zgłoszenia patentowego	Kraj na terenie którego opatentowany wynalazek korzysta z ochrony
1	Zawór oraz sposób modyfikacji zaworu	Krzysztof Churski, Piotr Garstecki	21.01.2010	P-390250	Polska
2	Metoda i układ do wytwarzania kropli na żądanie w układzie mikroprzepływowym oraz tworzenia sekwencji kropli o arbitralnie zadanych kombinacjach stężeń roztworów wejściowych	Krzysztof Churski, Piotr Korczyk, Piotr Garstecki	21.01.2010	P-390251	Polska
3	A process for the preparation of 6-O-acetyl-2-azido-3,4-di-O-benzyl-2-deoxy-D-glucopyranose	Z. Majka, J. Raczko, Z. Bartoszewski, S. Powąła, B. Radwański	16.03.2010	EO10461509.1 P061/02/EP	Europa
4	Platforma do pomiarów powierzchniowo wzmocnionego efektu Ramana	Dzięcielewski Igor (IWC), Hołyst Robert (IChF), Kamińska Agnieszka (IChF), Porowski Sylwester (IWC), Suski Tadeusz (IWC), Weyher Jan (IWC)	23.03.2010	P-390798	Polska
5	Układ i sposób zwiększania częstości repetycji impulsów laserowych	Yuriy Stepanenko	26.04.2010	P-391054	Polska

6	Metoda pokrywania powierzchni nanocząstkami	Maciej Paszewski, Marcin Fiałkowski, Ewelina Kalwarczyk, Tomasz Kalwarczyk, Katarzyna Winkler, Robert Hołyst	14.05.2010	P-391217	Polska
7	Kapsułki z hydrofilowym rdzeniem i polimerową otoczką i sposób ich wytwarzania	Piotr Garstecki, Marcin Izydorzak, Jacek Andrzej Michalski, Dominika Ogończyk	14.05.2010	P-391216	Polska
8	Kapsułki z hydrofilowym rdzeniem i polimerową otoczką i sposób ich wytwarzania	Piotr Garstecki, Marcin Izydorzak, Jacek Andrzej Michalski, Dominika Ogończyk	28.05.2010	P-391361	Polska
9	Sposób modyfikowania nanorurek węglowych zwłaszcza wielościennych	Leszek Stobiński	09.06.2010	P-391415	Polska
10	Sposób osadzania nanocząstek metalu na powierzchni oraz powierzchnia otrzymana tym sposobem	Joanna Niedziółka-Jönsson, Izabela Kamińska, Marcin Opałło	11.06.2010	P-391456	Polska
11	Związki luminescencyjne, sposób wytwarzania związków luminescencyjnych oraz ich zastosowanie	Janusz Lewiński, Kamil Sokółowski	07.07.2010	P-391776	Polska
12	Sposób otrzymywania celulozowego nanokompozytu z wbudowanymi nanorurkami węglowymi i celulozowy nanokompozyt z wbudowanymi nanorurkami węglowymi.	Jacek Gregorowicz, Robert Hołyst, Anna Kelm, Beata Kusiak	25.08.2010	P-392221	Polska
13	Sposób pokrywania hydrofilowych ciał stałych warstwą złota o rozbudowanej powierzchni oraz hydrofilowe ciało stałe pokryte warstwą złota o rozbudowanej powierzchni.	Katarzyna Winkler, Marcin Fiałkowski, Agnieszka Kamińska, Robert Hołyst	25.08.2010	P-392222	Polska
14	Sposób modyfikacji powierzchni mikrokanalów wykonanych w obiekcie poliwęglanowym i obiekt poliwęglanowy zawierający mikrokanal zmodyfikowany tym sposobem	Piotr Garstecki, Paweł Jankowski, Dominika Ogończyk	16.09.2010	P-392411	Polska
15	Sposób osadzania nanocząstek metalu na powierzchni oraz powierzchnia otrzymana tym sposobem i jej zastosowanie	Izabela Kamińska, Agnieszka Kamińska, Joanna Niedziółka-Jönsson, Robert Hołyst, Marcin Opałło	14.09.2010	P-392364	Polska
16	Zastosowanie roztworu borowodorku do czyszczenia platform do pomiarów powierzchniowo wzmocnionego efektu Ramana zawierających warstwę złota	Volodymyr Sashuk, Agnieszka Kamińska, Robert Hołyst, Marcin Fiałkowski	21.09.2010	P-392460	Polska
17	Zastosowanie roztworu amoniaku i wody utlenionej do czyszczenia platform do pomiarów powierzchniowo wzmocnionego efektu Ramana zawierających warstwę złota	Volodymyr Sashuk, Agnieszka Kamińska, Robert Hołyst, Marcin Fiałkowski	21.09.2010	P-392461	Polska
18	Sposób modyfikacji powierzchni poliwęglanu i powierzchnia poliwęglanu zmodyfikowana tym sposobem.	Piotr Garstecki, Paweł Jankowski, Ladislav Derzi	22.09.2010	P-392467	Polska
19	Pułapka feromonowa i system do automatycznego zliczania owadów w pułapce feromonowej	Jan Zasłona	11.10.2010	P-392614	Polska
20	Ogniwo cynkowo-tlenowe i jego zastosowanie	Wojciech Nogala, Ewa Roźniecka, Marcin Opałło	20.10.2010	P-392705	Polska

21	Sposób sklejanie płyt poliwęglanowych z zachowaniem ich mikro-struktury powierzchniowej	Piotr Garstecki, Dominika Ogonczyk, Judyta Wegrzyn, Pawel Jankowski	23.11.2010	01957/10	Szwajcaria
22	Sposób otrzymywania monodispersyjnych mikrożeli pektynowych z wykorzystaniem układu mikroprzepływowego	Dominika Ogończyk, Piotr Garstecki, Marta Siek	10.12.2010	P-393195	Polska
23	Biokatoda, sposób wykonania biokatody i ogniwo cynkowo-tlenowe obejmujące biokatodę	Ewa Roźniecka, Marcin Opałło, Martin Jönsson-Niedziółka, Joanna Niedziółka-Jönsson, Katarzyna Szot	10.12.2010	P-393196	Polska
24	Sposób wytwarzania kapsulek z hydrofilowym rdzeniem i polimerową otoczką	Piotr Garstecki, Marcin Izydorczak	14.12.2010	P-393261	Polska
25	Elektroda wielowarstwowa i jej zastosowanie	Anna Celebańska, Marcin Opałło, Adam Leśniewski, Dorota Tomaszewska	16.12.2010	P-393311	Polska

3. Informacja o poniesionych kosztach związanych ze zrealizowanymi zadaniami badawczymi objętymi planem zadaniowo-finansowym:

wydatki ogółem **17 724 990,88** zł, w tym:

- 1) środki z dotacji na działalność statutową **17 724 990,88** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **1 537 219,53** zł;
- 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
- 3) pozostałe środki **0,00** zł.

4. Struktura poniesionych kosztów:

Lp.	Przeznaczenie	Koszty ogółem	Koszty z dotacji
1	2	3	4
1.	Działania niezbędne do rozwoju specjalności naukowych lub kierunków badawczych oraz rozwoju kadry naukowej, w tym badania naukowe lub prace rozwojowe ujęte w planie finansowym jednostek naukowych	<b>9 527 320,61</b>	<b>9 527 320,61</b>
2.	Utrzymanie infrastruktury badawczej, w tym bibliotek i archiwów	<b>278 321,19</b>	<b>278 321,19</b>
3.	Zatrudnienie niezbędnej kadry naukowej i inżyniersko-technicznej	<b>7 306 737,20</b>	<b>7 306 737,20</b>
4.	Zakup lub wytworzenie aparatury naukowo-badawczej, związanej z realizacją zadań, o których mowa w pkt 1, niestanowiącej dużej infrastruktury badawczej	<b>295 346,07</b>	<b>295 346,07</b>
5.	Współpraca naukowa krajowa i zagraniczna, niezbędna do realizacji zadań, o których mowa w pkt 1	<b>240 144,23</b>	<b>240 144,23</b>
6.	Upowszechnianie nauki	<b>77 121,58</b>	<b>77 121,58</b>
7.	Restrukturyzacja jednostek naukowych w zakresie zadań, o których mowa w pkt 1, 3-5	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>

	RAZEM:	<b>17 724 990,88</b>	<b>17 724 990,88</b>
--	--------	----------------------	----------------------

5. Informacja o wynikach i efektach przeprowadzonej restrukturyzacji  
**nie dotyczy**

6. Rozliczenie przyznanych środków pod względem zgodności z planem i harmonogramem restrukturyzacji.  
**nie dotyczy**

## II. RAPORT Z WYKORZYSTANIA ŚRODKÓW PRZYZNANYCH NA UTRZYMANIE SPECJALNEGO URZĄDZENIA BADAWCZEGO

Czy jednostka otrzymała w ubiegłym roku dotację na utrzymanie specjalnego urządzenia badawczego: NIE

## III. RAPORT Z WYKORZYSTANIA ŚRODKÓW PRZYZNANYCH NA FINANSOWANIE DZIAŁALNOŚCI POLEGAJĄCEJ NA PROWADZENIU BADAŃ NAUKOWYCH LUB PRAC ROZWOJOWYCH ORAZ ZADAŃ Z NIMI ZWIĄZANYCH, SŁUŻĄCYCH ROZWOJOWI MŁODYCH NAUKOWCÓW ORAZ UCZESTNIKÓW STUDIÓW DOKTORANCKICH

Czy jednostka otrzymała w ubiegłym roku dotację na finansowanie działalności polegającej na prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych oraz zadań z nimi związanych, służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich: NIE

## IV. RAPORT Z WYKORZYSTANIA ŚRODKÓW PRZYZNANYCH NA UTRZYMANIE I POSZERZANIE NAUKOWYCH BAZ DANYCH

Nazwa bazy danych: **SCI FINDER**

1. Informacja o poniesionych kosztach:

Ogółem **94 134,63** zł, w tym:

- 1) środki z dotacji na działalność statutową **94 134,63** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **0,00** zł;
- 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
- 3) pozostałe środki **0,00** zł.

2. Informacja o wysokości niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny, z zaznaczeniem ich przeznaczenia **0,00**.

3. Liczba jednostek korzystających z bazy danych w ramach konsorcjum **16,00**.

4. Przeznaczenie niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny.  
**nie dotyczy**

5. Informacja o wykorzystaniu bazy danych w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku.  
**12.489 wejść na stronę bazy**

Nazwa bazy danych: **ACS**

## 1. Informacja o poniesionych kosztach:

Ogółem **34 448,19** zł, w tym:

- 1) środki z dotacji na działalność statutową **34 448,19** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **0,00** zł;
- 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
- 3) pozostałe środki **0,00** zł.

2. Informacja o wysokości niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny, z zaznaczeniem ich przeznaczenia **0,00**.3. Liczba jednostek korzystających z bazy danych w ramach konsorcjum **41,00**.4. Przeznaczenie niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny.  
**nie dotyczy**5. Informacja o wykorzystaniu bazy danych w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku.  
**17.628 wejść na stronę bazy**Nazwa bazy danych: **AIP/APS**

## 1. Informacja o poniesionych kosztach:

Ogółem **46 691,19** zł, w tym:

- 1) środki z dotacji na działalność statutową **46 691,19** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **0,00** zł;
- 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
- 3) pozostałe środki **0,00** zł.

2. Informacja o wysokości niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny, z zaznaczeniem ich przeznaczenia **0,00**.3. Liczba jednostek korzystających z bazy danych w ramach konsorcjum **40,00**.4. Przeznaczenie niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny.  
**nie dotyczy**5. Informacja o wykorzystaniu bazy danych w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku.  
**4.347 wejść na stronę bazy**Nazwa bazy danych: **RSC**

## 1. Informacja o poniesionych kosztach:

Ogółem **25 496,80** zł, w tym:

\*) w przypadku gdy wniosek podpisany jest przez prorektora, do wniosku dołącza się pełnomocnictwo/ upoważnienie.

- 1) środki z dotacji na działalność statutową **25 496,80** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **0,00** zł;
  - 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
  - 3) pozostałe środki **0,00** zł.
2. Informacja o wysokości niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny, z zaznaczeniem ich przeznaczenia **0,00**.
  3. Liczba jednostek korzystających z bazy danych w ramach konsorcjum **30,00**.
  4. Przeznaczenie niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny.  
**nie dotyczy**
  5. Informacja o wykorzystaniu bazy danych w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku.  
**5.436 wejść na stronę bazy**

Nazwa bazy danych: **Proquest**

1. Informacja o poniesionych kosztach:  
Ogółem **4 744,84** zł, w tym:
  - 1) środki z dotacji na działalność statutową **4 744,84** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **0,00** zł;
  - 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
  - 3) pozostałe środki **0,00** zł.
2. Informacja o wysokości niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny, z zaznaczeniem ich przeznaczenia **0,00**.
3. Liczba jednostek korzystających z bazy danych w ramach konsorcjum **27,00**.
4. Przeznaczenie niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny.  
**nie dotyczy**
5. Informacja o wykorzystaniu bazy danych w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku.  
**1.499 wejść na stronę bazy**

Nazwa bazy danych: **HORIZON**

1. Informacja o poniesionych kosztach:  
Ogółem **44 687,00** zł, w tym:
  - 1) środki z dotacji na działalność statutową **44 687,00** zł, w tym środki przeniesione z roku poprzedniego **0,00** zł;
  - 2) inne środki budżetowe **0,00** zł;
  - 3) pozostałe środki **0,00** zł.

\*) w przypadku gdy wniosek podpisany jest przez prorektora, do wniosku dołącza się pełnomocnictwo/ upoważnienie.



2. Informacja o wysokości niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny, z zaznaczeniem ich przeznaczenia **0,00**.
3. Liczba jednostek korzystających z bazy danych w ramach konsorcjum **24,00**.
4. Przeznaczenie niewykorzystanych środków z dotacji, przeniesionych na rok następny.  
**nie dotyczy**
5. Informacja o wykorzystaniu bazy danych w roku poprzedzającym rok złożenia wniosku.  
**16.608 wejść na stronę bazy**

#### **G. INFORMACJE O OSOBIE ODPOWIEDZIALNEJ ZA SPORZĄDZENIE WNIOSKU**

Imię i nazwisko: **Robert Holyst**, tel: **22 3433108**, faks: **22 343 3333**, e-mail: **rholyst@ichf.edu.pl**  
adres: **01-224 Warszawa, ul. Kasprzaka 44/52**

pieczęć jednostki

Główny księgowy/Kwestor

Kierownik jednostki

Rektor\*

data

podpis i pieczęć

podpis i pieczęć

podpis i pieczęć

\*) w przypadku gdy wniosek podpisany jest przez prorektora, do wniosku dołącza się pełnomocnictwo/ upoważnienie.