

AUTOREFERAT

1) Imię i nazwisko

Piotr Bernatowicz

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

- tytuł magistra chemii, Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, Warszawa, 1995
- stopień doktora nauk chemicznych, Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa, 2001

tytuł rozprawy doktorskiej:

„Cross-correlations of nuclear quadrupolar interactions in the studies on molecular structure and dynamics in liquids.”

promotor: dr hab. Sławomir Szymański

Praca została wyróżniona nagrodą Prezesa Rady Ministrów.

3) Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych/artystycznych.

- 1995-1996: staż w Instytucie Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk na stanowisku asystenta
- 1996-2001: uczestnik Studium Doktoranckiego Instytucie Chemii Organicznej PAN (1998: stypendium DAAD na Uniwersytecie w Bayreuth w Niemczech)
- 2002-2004: staż podoktorski na Uniwersytecie Sztokholmskim.
- 2004: od lutego 2004 roku do czerwca 2004 roku asystent w Instytucie Chemii Organicznej PAN w Warszawie.
- 2004-2006: adiunkt w Instytucie Biochemii i Biofizyki PAN w Warszawie.
- od 2006 do teraz: adiunkt w Instytucie Chemii Fizycznej PAN w Warszawie (2006-2007: staż zagraniczny w ramach stypendium Fundacji Humboldta; pierwsza część stażu na Wydziale Fizyki Uniwersytetu w Dortmundzie, a druga część na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Yorku)

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

a) tytuł osiągnięcia naukowego/artystycznego,

„Metody magnetycznego rezonansu jądrowego w badaniach dynamiki molekularnej - separacja globalnej dynamiki molekuł i ultraszybkiej dynamiki lokalnej.”

b) (autor/autorzy, tytuł/tytuły publikacji, rok wydania, nazwa wydawnictwa),

1. Bernatowicz P.*, Kowalewski J., Szymański S., *Nuclear spin relaxation in nonrigid molecules: Discrete multisite local dynamics combined with anisotropic molecular reorientation*, J. Chem. Phys., **124**, art. no. 024108 (2006), IF=3.166
Mój wkład w tej pracy oceniam na 70-75%. Wyprowadziłem zawartą w pracy teorię/formalizm matematyczny i napisałem główną część manuskryptu z wyjątkiem części zawierającej dyskusję przypadków szczególnych.
2. Bernatowicz P., Kowalewski J.*, Sandström D., *NMR relaxation study of the protonated form of 1,8-bis(dimethylamino)naphthalene in isotropic solution: anisotropic motion outside of extreme narrowing and ultrafast proton transfer*, J. Phys. Chem. A, **109**, 57 (2005), IF=2.898
Mój wkład w tej pracy oceniam na 80-85%. Wymyśliłem koncepcję pracy, wykonałem konieczną syntezę znaczonego izotopowo związku modelowego, wykonałem 95% pomiarów NMR, napisałem oprogramowanie do numerycznej analizy wyników (100%), napisałem manuskrypt (w 80%).
3. Bernatowicz P.*, Kowalewski J., *Carbon-13 NMR relaxation study of 1,8-bis(dimethylamino)naphthalene in isotropic solution*, J. Phys. Chem. A, **112**, 4711 (2008), IF=2.871
Mój wkład w tej pracy oceniam na 90%. Wymyśliłem koncepcję pracy, wykonałem pomiary NMR (100%), napisałem oprogramowanie do numerycznej analizy wyników, napisałem manuskrypt (w 90%).
4. Bernatowicz P.*, Ruszczyńska-Bartnik K., Ejchart A., Dodziuk H., Kaczorowska E., Ueda H., *Carbon-13 NMR Relaxation Study of the Internal Dynamics in Cyclodextrins in Isotropic Solution*, J. Phys. Chem. B, **114**, 59 (2010), IF=3.603
Mój wkład w tej pracy oceniam na 65%. Wykonałem 33% koniecznych pomiarów NMR, napisałem oprogramowanie do numerycznej analizy wyników (100%), zaplanowałem metodykę badań (50%), przeprowadziłem analizę wyników (80%) i napisałem manuskrypt (80%).
5. Bernatowicz P., *A Simple One-Dimensional Method of Chemical Shift Anisotropy Determination Under MAS Conditions*, J. Magn. Reson., **207**, 348 (2010), IF=2.333
6. Bernatowicz P., *Determination of the Rotational Diffusion Tensor of Porphycene by ¹³C and ¹H Spin Relaxation Methods*, J. Phys. Chem. A, **115**, 8604 (2011), IF=2.946
7. Bernatowicz P., *Accurate determination of ultrafast proton transfer rate in porphycene by nuclear spin relaxation*, Phys. Chem. Chem. Phys., **xxx**, xxx (2013), IF=3.573, DOI: 10.1039/C3CP50963J

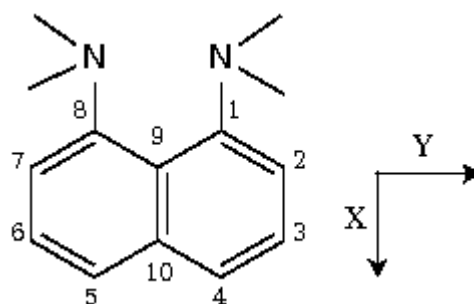
c) omówienie celu naukowego/artystycznego ww. pracy/prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania.

Magnetyczny rezonans jądrowy (MRJ, ang. NMR) jest uniwersalnym narzędziem badawczym od dawna używanym w badaniach dynamiki molekularnej. Stałe szybkości procesów powolnych (o wartościach poniżej 10^5 - 10^6 s⁻¹) mogą być wyznaczone poprzez numeryczną analizę kształtu linii MRJ lub w eksperymentach typu EXSY (EXchange SpectroscopY). Procesy szybsze, o stałych szybkości w zakresie 10^6 - 10^9 s⁻¹, są zwykle wystarczająco szybkie, aby całkowicie uśrednić obserwowane w MRJ sygnały. Do ich badania w reżymie wysokiej rozdzielczości wykorzystuje się zwykle techniki pomiaru czasów relaksacji w wirującym układzie współrzędnych. W polach magnetycznych typowych dla współczesnych spektrometrów MRJ wysokiej rozdzielczości, procesy jeszcze szybsze, o stałych szybkości przekraczających 10^9 s⁻¹, mogą być efektywnie badane metodami relaksacyjnymi w laboratoryjnym układzie współrzędnych. Zwykle tego typu metody stosuje się do niewielkich molekuł, gdy jedynym źródłem relaksacji spinowej jest ich globalna reorientacja, która w niezbyt lepkich rozpuszczalnikach jest scharakteryzowana stałymi szybkości 10^9 - 10^{11} s⁻¹. Problem jest znacznie bardziej skomplikowany, gdy globalnej dynamice towarzyszy dynamika lokalna (wewnątrzcząsteczkowy przeskoc protonu, reorientacja grupy metylowej, rotacja lub drgania torsyjne pierścienia itd.) o podobnej częstości, gdyż wtedy obie dynamiki mają porównywalny wpływ na procesy relaksacyjne. Celem niniejszej pracy było opracowanie metodyki badań skutecznej w takich trudnych przypadkach.

W pracy [1] wyprowadzono formalizm matematyczny wiążący parametry dynamiki i struktury molekularnej z tzw. gęstościami spektralnymi, czyli wielkościami charakteryzującymi stochastyczne ruchy molekuł w funkcji częstotliwości. Kombinacje liniowe wartości gęstości spektralnych dla znanych częstotliwości można wyznaczyć w pomiarach MRJ takich wielkości jak prędkość relaksacji podłużnej, prędkość relaksacji poprzecznej, jądrowy efekt Overhausera (NOE) itp. Już wcześniej sformułowano teoretyczne modele relaksacji w układach z dynamiką lokalną, jednakże odnośny formalizm był mało uniwersalny, co ograniczało dramatycznie zakres zastosowań tych modeli do molekuł o wysokiej (osiowej) lub bardzo wysokiej (sferycznej) symetrii. Dodatkowo, we wcześniejszych podejściach stosowano skrajnie uproszczony opis oddziaływań spinowych leżących u podstaw zjawiska relaksacji, zakładający ich osiową symetrię. Uniemożliwiało to dokładne badania dynamiki molekularnej nawet dla molekuł o osiowej bądź sferycznej symetrii w przypadkach, gdy istotnym mechanizmem relaksacji jest np. powszechnie występująca anizotropia przesunięcia chemicznego, lub (rzadziej spotykane) elektryczne oddziaływanie kwadrupoli jądrowych. Te dwa ostatnie mechanizmy osiową symetrię posiadają bowiem tylko w bardzo szczególnych przypadkach tzn. wtedy, gdy wiązanie odpowiedniego

atomu z resztą cząsteczki leży na trój- lub wyżej krotnej osi symetrii molekuly. Formalizm wyprowadzony w pracy [1] wolny jest od takich ograniczeń. Można go stosować w przypadku molekuł o dowolnym kształcie, w których dyskretna dynamika lokalna (a jak zostało wykazane w pracy [4], nie tylko dyskretna) nie jest statystycznie skorelowana z dynamiką globalną, tzn., gdy dynamika lokalna nie powoduje zmiany tensora dyfuzji rotacyjnej molekuly. Formalizm ten stanowi więc istotne rozszerzenie zakresu stosowalności metod spinowej relaksacji jądrowej w badaniach dynamicznych w cieczach. Wzory ogólne wyprowadzone w pierwszej części pracy [1] są dość skomplikowane. Dlatego druga część tej pracy poświęcona jest uproszczeniom, które można poczynić w szczególnych, często spotykanych przypadkach, jak np. przeskok protonu pomiędzy dwoma akceptorami wiązania wodorowego lub wymiany wielootoczeniowej o równych populacjach (zahamowana rotacja grupy metylowej).

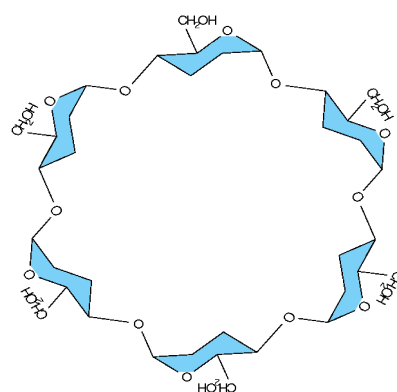
W pracach [2] i [3] opisane jest wykorzystanie formalizmu wyprowadzonego w pracy [1] w badaniach tzw. gąbki protonowej (Rys. 1), oznaczanej dalej jako DMAN (od ang. 1,8-bis(DiMethylAmino)Naphthalene). Molekuła ta jest bardzo silną zasadą i w reakcji z kwasem ulega protonowaniu, a zaabsorbowany proton zostaje uwięziony w symetrycznej podwójnej studni potencjału, pomiędzy dwoma atomami azotu. Celem pracy [2] było zbadanie dynamiki protonu przeskakującego w mostku N...H...N



Rysunek 1: 1,8-bis(dimetyloamino)naftalen (DMAN) i osie główne jego tensora dyfuzji rotacyjnej

pomiędzy minimami tego potencjału. Na pierwszym etapie zmierzona w kilku polach magnetycznych relaksację podłużną jąder ^{13}C i efekt $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NOE w szkielecie naftalenowym poddano analizie numerycznej. W jej wyniku wyznaczono z dużą dokładnością wszystkie komponenty główne tensora dyfuzji rotacyjnej protonowanego DMANu w zakresie temperatur od 213 do 303 K. Kierunki osi głównych tego tensora są zdeterminowane przez efektywną (średnią) symetrię C_{2v} molekuly, a ich położenie jest pokazane na Rys. 1. W następnym kroku, na podstawie analizy numerycznej relaksacji podłużnej jąder ^{15}N i efektu $^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ NOE ustalono, że w całym przebadanym zakresie temperatur mostkowy proton ulega przeskokom z częstościami dużo większymi (przynajmniej o 2 rzędy wielkości) niż globalna reorientacja molekuly, która była rzędu 10^{10} s^{-1} . Dokładne wyznaczenie częstości przeskoków dla tak szybkiej dynamiki nie było możliwe. W pracy [3] wyznaczono składowe główne tensora dyfuzji rotacyjnej DMANu nieprotonowanego z zastosowaniem podobnej metodyki oraz w podobnym zakresie temperatur, jak to zrobiono wcześniej w przypadku DMANH^+ . Porównanie energii aktywacji wyznaczonej z wykresów Arrheniusa wykonanych dla temperaturowych zmian poszczególnych komponentów tensora dyfuzji

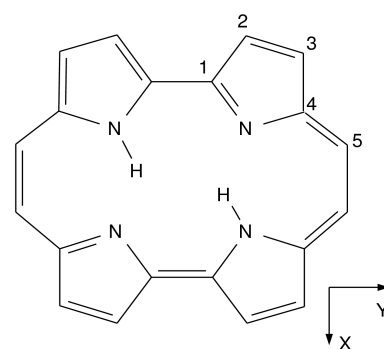
rotacyjnej DMAN i DMANH^+ pozwoliło na stwierdzenie, że protonowanie prowadzi do znacznego wzrostu energii aktywacji dla reorientacji wokół osi Y i Z, zaś energia aktywacji dla reorientacji wokół osi X pozostaje praktycznie niezmienna. Wyciągnięto z tego wniosek, że przeciwjon, którym w tym przypadku był anion NO_3^- , tworzy w roztworze parę jonową z DMANH^+ podchodząc do kationu od strony mostka $\text{N}\dots\text{H}\dots\text{N}$ i zajmując pozycję na osi symetrii C_2 DMANH^+ . Udowodniono, że para taka jest trwała na skali czasu reorientacji molekularnej.



Rysunek 2: Cyklodekstryna α

W pracy [4] przedstawiono badania relaksacyjne serii 7 cyklodekstryn. Najmniejsza z nich, α (Rys. 2), jest molekułą makrocykliczną składającą się z 6 pierścieni glukopiranozowych połączonych ze sobą wiązaniami O-glikozydowymi. Największa, η , jest analogicznym makrocyklem złożonym z 12 pierścieni glukozowych. Zaproponowany w pracy [4] mechanizm dynamiki wewnątrzcząsteczkowej polegający na drganiach torsyjnych poszczególnych pierścieni glukopiranozowych wokół osi wyznaczonej przez ich glikozydowe atomy tlenu, O1 i O4, prowadzi do dobrego odtworzenia danych relaksacyjnych. W małych cyklodekstrynach, α – γ , drgania takie są szybsze niż reorientacja molekularna, a w dużych, δ – η , wolniejsze. Otrzymane z analizy relaksacji spinowej średnie nachylenia płaszczyzn pierścieni glukopiranozowych w stosunku do płaszczyzn makrocykli, oraz amplitudy drgań torsyjnych tych pierścieni, są dla cyklodekstryn α – γ zgodne z pomiarami krystalograficznymi oraz z wynikami obliczeń metodami dynamiki molekularnej opisanymi w literaturze. Analogiczne dane strukturalne dla większych makrocykli, δ – η , otrzymane innymi niż NMR metodami, nie są niestety dostępne w literaturze. Wyznaczone składowe tensorów dyfuzji rotacyjnej wykazują anomalię dla cyklodekstryny β w porównaniu z α i γ . Choć nie jest znany mikroskopowy mechanizm powodujący tę anomalię, to jednak dobrze znany jest fakt niezwykle małej rozpuszczalności w wodzie cyklodekstryny β , przy bardzo dobrej rozpuszczalności analogów α i γ . Na uwagę zasługuje również fakt, że w badanych cyklodekstrynach założono ciągły mechanizm dynamiki wewnątrzcząsteczkowej, podczas gdy formalizm wyprowadzony w pracy [1] zakłada dynamikę dyskretną. Okazało się jednak, że dynamikę ciągłą można w praktyce skutecznie opisać jako dynamikę dyskretną z udziałem dużej ilości hipotetycznych konformerów. Skuteczność tego typu podejścia w przypadku tak trudnych modeli jak cyklodekstryny pokazuje, że ograniczenie wyprowadzonego formalizmu, wynikające z założenia dyskretnego charakteru dynamiki lokalnej, choć pozornie bardzo poważne, *de facto* nie obowiązuje.

Praca [5] poświęcona jest nowatorskiej, alternatywnej do powszechnie używanej 2D-PASS, metodzie wyznaczania składowych głównych tensorów anizotropii przesunięcia chemicznego. Składowe te, przeliczone na tzw. moce oddziaływań relaksacyjnych, stanowią parametry w równaniach wiążących dynamikę molekularną z gęstościami spektralnymi, wyprowadzonych w pracy [1]. Ich znajomość jest niezbędna do precyzyjnej interpretacji danych relaksacyjnych. Metoda ta polega na równoległej analizie numerycznej serii kilku widm MAS wykonanych przy różnych częstościach wirowania próbki proszkowej. W pracy [5] została ona z powodzeniem zastosowana do wyznaczenia tensorów anizotropii przesunięcia chemicznego jąder ^{13}C w porficynie, użytych w późniejszych badaniach relaksacyjnych tej molekuly opisanych w pracy [6]. Opracowana metoda jest mniej wymagająca sprzętowo od 2D-PASS, gdyż nie wymaga synchronizacji pulsów radiowych z położeniem rotora. Wymaga ona także wykonania mniejszej ilości widm i mniejszej ilości powtórzeń w każdym widmie niż 2D-PASS.



Rysunek 3: Porficyna i osie główne jej tensora dyfuzji rotacyjnej

W pracy [6] na podstawie analizy danych relaksacyjnych jąder ^{13}C wyznaczono tensor dyfuzji rotacyjnej porficyny (Rys. 3). Okazało się, że reorientacja wokół osi Z jest znacząco szybsza niż wokół pozostałych osi. Jest to wynik o tyle zaskakujący, że składowa Z w tensorze momentu bezwładności tej molekuly ma wartość największą, a zatem można by oczekiwać, że reorientacja wokół tej osi będzie najwolniejsza. Również stosunek składowych $X/Y=1.56$ w tensorze dyfuzji rotacyjnej nie odzwierciedla relacji w tensorze momentu bezwładności, w którym składowe te są prawie równe. Prowadzi to do wniosku, że moment bezwładności nie może być skutecznie używany do przewidywania własności reorientacji molekularnej nawet w grubym przybliżeniu. W pracy [6] dodatkowo rozwiązano problem metodologiczny eksperymentalnego wyznaczania tzw. poprawki wibracyjnej do stałej dipolowej przez jedno wiązanie w układzie $^{13}\text{C}-^1\text{H}$ w tzw. reżimie maksymalnego zwężenia (ang. extreme narrowing). Wcześniej, w pracy [2], poprawkę wibracyjną wyznaczano w temperaturach, w których układ spinowy był poza obszarem maksymalnego zwężenia i następnie w dość arbitralny sposób ekstrapolowano ją do obszaru maksymalnego zwężenia. Dla porficyny jednak reorientacja molekularna w temperaturze pokojowej była na tyle szybka, a rozpuszczalność związku w niższych temperaturach na tyle słaba, że wyprowadzenie układu spinowego z obszaru maksymalnego zwężenia nie było możliwe i konieczne okazało się opracowanie metody alternatywnej. Cel ten osiągnięto poprzez dodanie do danych relaksacyjnych jąder ^{13}C również danych relaksacyjnych jąder ^1H i ich wspólną analizę. Otrzymana poprawka

wibracyjna była bardzo podobna do tej wyznaczonej w DMANH⁺.

W pracy [7] opisano badania przeprowadzone dla porficyzny wzbogaconej w izotop ¹⁵N. Z analizy numerycznej danych relaksacyjnych tego izotopu, przy wykorzystaniu wartości składowych głównych tensora dyfuzji rotacyjnej wyznaczonych w pracy [6], wyznaczono ilościowo częstość dynamiki protonów w mostkach N...H...N otrzymując wartość $(1.0 \pm 0.57) \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Pozostaje ona w dobrej zgodności z literaturową wartością $(5.8 \pm 0.3) \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ wyznaczoną w cieczy metodami spektroskopii optycznych przez zespół profesora Waluka. Obie te wartości znacząco odbiegają od wartości $4.9 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ wyznaczonej w ciele stałym przez zespół profesora Limbacha. Omawiana praca [7] przedstawia pierwszy przypadek ilościowego wyznaczenia metodą MRJ częstości ultraszybkiej dynamiki lokalnej w molekuule ulegającej w cieczy izotropowej globalnej reorientacji o częstości współmiernej z badaną dynamiką lokalną.

Podsumowując, w wyniku prac wykonanych w ramach niniejszej rozprawy opracowano formalizm pozwalający na dokładne badania dynamiki molekularnej w cieczach za pomocą metody MRJ, wolny od większości ograniczeń cechujących podejścia stosowane poprzednio. Na kilku przykładach dopracowano metodologię badawczą opartą o ten formalizm. Udowodniono, że MRJ jest metodą, którą z dużą dokładnością można badać ultraszybkie zjawiska dynamiczne, zarówno wewnątrzcząsteczkowe jak i międzycząsteczkowe, nawet w przypadku, gdy odpowiednia dynamika globalna zachodzi na podobnej skali czasu. Opracowana metoda umożliwia również wyznaczanie parametrów tej ostatniej z dużą dokładnością.

5) Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych (artystycznych).

Po obronie rozprawy doktorskiej byłem współautorem następujących 17 publikacji, które nie stanowią części pracy habilitacyjnej:

1. Dinnebier R. E., Bernatowicz P., Helluy X., Sebald A., Wunschel M., Fitch A., van Smaalen S., *Structure of compounds $E(\text{SnMe}_3)_4$ ($E=\text{Si}, \text{Ge}$) as seen by high-resolution X-ray powder and solid-state NMR*, Acta Crystallogr. B, **58**, 52 (2002), IF=2.026
2. Bernatowicz P., Szymański S., *Wave properties of a methyl group under ambient conditions*, Phys. Rev. Lett., **89**, art. no. 023004 (2002), IF=7.323
3. Kamińska-Trela K., Bernatowicz P., Lüttke W., Machinek R., Traetteberg M., *One-bond ^{13}C - ^{13}C coupling constants in alkyl-substituted cyclopropenes: experimental and theoretical studies*, Magn. Reson. Chem., **40**, 640 (2002), IF=0.994
4. Bernatowicz P., Kruk D., Kowalewski J., Werbelow L., *^{13}C NMR lineshapes for the (CHH)-*

- ^{13}C - ^2H - ^2H isotopomeric spin grouping, ChemPhysChem, **3**, 933 (2002), IF=3.862
5. Jackowski K., Bernatowicz P., Wielogórska E., *Intermolecular interactions of aliphatic nitriles in aprotic solvents studied by ^{13}C and ^{14}N NMR chemical shifts*, Z. Phys. Chem., **216**, 1401 (2002), IF=0.854
 6. Wunschel M., Dinnebier R. E., Carlson S., Bernatowicz P., van Smaalen S., *Influence of the molecular structures on the high-pressure and low-temperature phase transitions of plastic crystals*, Acta Crystallogr. B, **59**, 60 (2003), IF=3.643
 7. Bernatowicz P., Szymański S., *Magnetic equivalence of terminal nuclei in the azide anion broken by nuclear spin relaxation*, Mol. Phys., **101**, 353 (2003), IF=1.591
 8. Czernski I., Bernatowicz P., Jaźwiński J., Szymański S., *Nonclassical effects in liquid-phase nuclear magnetic resonance spectra of 9-methyltritycene derivatives*, J. Chem. Phys., **118**, 7157 (2003), IF=2.95
 9. Bernatowicz P., Szymański S., *NMR lineshape equations for hindered methyl group: a comparison of the semi-classical and quantum mechanical models*, J. Magn. Reson., **164**, 60 (2003), IF=2.084
 10. Bernatowicz P., Czernski I., Jaźwiński J., Szymański S., *Carr-Purcell echo spectra in the studies of lineshape effects. Nonclassical hindered rotation of methyl groups in 1,2,3,4-tetrachloro-9,10-dimethyltritycene*, J. Magn. Reson., **169**, 284 (2004), IF=2.461
 11. Bernatowicz P., Kowalewski J., Kruk D., Werbelow L. G., *^{13}C NMR line shapes in the study of dynamics of perdeuterated methyl groups*, J. Phys. Chem. A, **108**, 9018 (2004), IF=2.639
 12. Szymański S., Bernatowicz P., *The Symmerization Postulate of Quantum Mechanics in NMR Spectra*, Ann. Rep. on NMR Spectr., **54**, 1 (2005), IF=1.778
 13. Bernatowicz P., Nowakowski M., Dodziuk H., Ejchart A., *Determination of association constants at moderately fast chemical exchange: Complexation of camphor enantiomers by alpha-cyclodextrin*, J. Magn. Reson., **181**, 304 (2006), IF=2.076
 14. Ghalebani L., Bernatowicz P., Aski S. N., Kowalewski J., *Cross-correlated and conventional dipolar carbon-13 relaxation in methylene groups in small, symmetric molecules*, Concepts Magn. Reson. A, **30**, 100 (2007), IF=0.812
 15. Bugaj M., Baran P. A., Bernatowicz P., Brożek P., Kamieńska-Trela K., Krówczyński A., Kamieński B., *Structural studies on aryl-substituted enaminketones and their thio analogues. Part I. Analysis of high-resolution ^1H , ^{13}C NMR and ^{13}C CP MAS spectra combined with GIAO-DFT calculations*, Magn. Reson. Chem., **47**, 830-842 (2009), IF=1.612
 16. Gregorowicz J., Bernatowicz P., *Phase behaviour of L-lactic acid based polymers of low*

molecular weight in supercritical carbon dioxide at high pressures, J. Supercrit. Fluids, **51**, 270-277 (2009), IF=2.639

17. Zep A., Aya S., Aihara K., Ema K., Pocięcha D., Madrak K., Bernatowicz P., Takezoe H., Gorecka E., *Multiple nematic phases observed in chiral mesogenic dimers*, J. Mater. Chem. C, **1**, 46 (2013), IF=5.968

W 2006 roku otrzymałem stypendium naukowe Fundacji Humboldta.

Warszawa, 6.05.2013

Piotr Bernatowicz