



**Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
Wydział Chemii**

Autoreferat

***„Przejścia fazowe i reorientacja molekularna w wybranych
krystalicznych jonowych związkach koordynacyjnych z
dynamicznym orientacyjnym nieuporządkowaniem”***

dr Łukasz Hetmańczyk

załącznik 1

**do wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk
chemicznych, dyscyplina naukowa chemia**

Kraków, 2016

Spis treści

1.	Dane osobowe i kontaktowe.....	3
2.	Posiadane dyplomy i stopnie naukowe	3
3.	Przebieg zatrudnienia w jednostkach naukowych	3
4.	Staże zagraniczne	4
5.	Nagrody	4
6.	Granty badawcze (pozyskanie i główny wykonawca)	4
7.	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.)	5
7.1.	Tytuł osiągnięcia naukowego.....	5
7.2.	Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego.....	5
7.3.	Opis osiągnięcia naukowego	7
7.3.1.	<i>Wprowadzenie</i>	7
7.3.2.	<i>Przedmiot i cel badań</i>	9
7.3.3.	<i>Stosowane metody badawcze</i>	10
7.3.4.	<i>Omówienie głównych rezultatów</i>	11
7.3.5.	<i>Podsumowanie</i>	22
7.3.6.	<i>Perspektywy dalszych badań</i>	23
7.3.7.	<i>Literatura</i>	24
7.4.	Dane bibliometryczne publikacji wybranych do postępowania habilitacyjnego:	26
8.	Szczegółowy wykaz całkowitego dorobku naukowego.....	26
8.1.	Dane bibliometryczne.....	26
8.2.	Wykaz pozostałych prac naukowych opublikowanych poza cyklem wymienionym w pkt. 7.2	26
8.2.1.	Publikacje ujęte w bazie Journal Citation Reports (JCR) oraz w wykazie A listy MNiSW	26
8.2.2.	Publikacje nie ujęte w bazie Journal Citation Reports (JCR)	31
8.2.3.	Współautorstwo rozdziałów w książkach.....	32
9.	Udział w konferencjach naukowych (postery i wystąpienia ustne)	33
10.	Praca na rzecz środowiska naukowego	38
11.	Współpraca naukowa.....	39
12.	Działalność dydaktyczna.....	39
13.	Działalność organizacyjna	41

1. Dane osobowe i kontaktowe

Imię i nazwisko: **Łukasz Hetmańczyk**
Data i miejsce urodzenia: 22 kwietnia 1975 r., Kraków
Stan cywilny: żonaty, jedno dziecko
Aktualne miejsce zatrudnienia: Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zakład Fizyki Chemicznej, Zespół Badań Przemian Fazowych, ul. Ingardena 3, 30-060 Kraków,
e-mail: hetmancz@chemia.uj.edu.pl,
lukasz.hetmanczyk@uj.edu.pl
telefon służbowy +48 12 663 22 65

2. Posiadane dyplomy i stopnie naukowe

wrzesień 2003 uzyskanie stopnia naukowego doktora nauk chemicznych. Praca doktorska zatytułowana: *"Przejścia fazowe w związkach kompleksowych [Zn(NH₃)₄](BF₄)₂, [Zn(NH₃)₄](ClO₄)₂ i [Cu(NH₃)₅](ClO₄)"*. Promotor: dr hab. Anna Migdał-Mikuli. Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zakład Fizyki Chemicznej.

czerwiec 1999 uzyskanie tytułu magistra chemii. Praca magisterska zatytułowana: *„Polimorfizm związków kompleksowych typu [M(NH₃)₆](XY₄)₂, gdzie M = Co²⁺, Cd²⁺, XY₄ = ClO₄⁻, BF₄⁻”*. Promotor: dr hab. Anna Migdał-Mikuli. Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zakład Fizyki Chemicznej.

3. Przebieg zatrudnienia w jednostkach naukowych

1.10.2015–30.09.2017: specjalista naukowo–techniczny na Wydziale Chemii UJ

1.10.2006–30.09.2015: adiunkt w Zakładzie Fizyki Chemicznej na Wydziale Chemii UJ

3.03.2013–30.09.2015: pracownik naukowy w Zjednoczonym Instytucie Badań Jądrowych w Dubnej, Laboratorium Fizyki Neutronowej im. I.M. Franka, grupa nieelastycznego rozpraszania neutronów

1.04.2012–30.09.2012: adiunkt w Zakładzie Fizyki Chemicznej na Wydziale Chemii UJ

1.10.2003–30.09.2006: asystent w Zakładzie Fizyki Chemicznej na Wydziale Chemii UJ

1.10.1999–30.09.2003: doktorant na Wydziale Chemii UJ

4. Staże zagraniczne

- 12.02 – 23.02.2001, 2.12 – 14.12.2002, 16.05 – 27.05.2005, 3.09 – 15.09.2006 staże naukowe w **Zjednoczonym Instytucie Badań Jądrowych w Dubnej** (Rosja) w zakresie wykorzystania metod neutronowych do badania struktury związków i dynamiki molekularnej.
- 14.09 – 18.09.2004 uczestnictwo w Workshop on Neutrons and Numerical Methods 2, **Insitut Laue-Langevin, Grenoble, Francja.**

5. Nagrody

- Nagroda Zespołowa JM Rektora UJ za osiągnięcia w pracy naukowej – 2007 r
- Brązowy medal za długoletnią służbę – nadany postanowieniem Prezydenta RP z dnia 28 września 2016 r.

6. Granty badawcze (pozyskanie i główny wykonawca)

- Złożony wniosek o finansowanie projektu badawczego własnego nr N N204 027638 w ramach 38 konkursu projektów badawczych pt. „Właściwości termiczne i polimorfizm fazowy nowych kryształów mezomorficznych oraz kryształów koordynacyjnych z dynamicznym orientacyjnym nieuporządkowaniem”. Decyzją Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego Nr 0276/B/H03/2009/38 z dnia 14 stycznia 2010 r wniosek nie został zaklasyfikowany do finansowania.
- Grant badawczy Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu RP ds. ZIBJ w Dubnej i Dyrekcji ZIBJ z dnia 26.04.2012. Nr 235, p.9 „Studies of the structure, phase transitions and dynamics in the series of inorganic phase change materials and novel iodonium photoinitiators for cationic polymerization”; temat grantu 04-4-1069-2009/2014.
- Grant badawczy (kontynuacja) Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu RP ds. ZIBJ z Dyrekcją ZIBJ z dnia 11.02.2013 Nr 61 p.9 „Studies of the structure, phase transitions and dynamics in the series of inorganic phase change materials and novel iodonium photoinitiators for cationic polymerization”; temat grantu 04-4-1069-2009/2014.
- Grant badawczy Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu RP ds. ZIBJ w Dubnej i Dyrekcji ZIBJ z dnia 25.02.2014. Nr 118, p.7 „Studies of the structure, phase transitions and dynamics in the series of inorganic materials”; temat grantu 04-4-1069-2009/2014.
- Program badawczy (kontynuacja) Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu RP ds. ZIBJ z Dyrekcją ZIBJ z dnia 27.01.2015 Nr 45 p.17 „Studies of the structure, phase transitions and dynamics in the series of inorganic phase change materials”; temat grantu 04-4-1121-2015/2017.
- Program badawczy (kontynuacja) Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu RP ds. ZIBJ z Dyrekcją ZIBJ z dnia 22.01.2016 Nr 47 p.18 „Studies of the structure, phase transitions and dynamics in the series of inorganic phase change materials”; temat grantu 04-4-1121-2015/2017.

7. 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.)

7.1. Tytuł osiągnięcia naukowego

Jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę habilitacji wybrano cykl 10. jednotematycznych artykułów naukowych opublikowanych w latach 2007-2016 w recenzowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym, ujętych w bazie Journal Citation Reports (JCR) oraz w wykazie A listy MNiSW. Ten cykl publikacji ujęto pod wspólnym tytułem:

„Przejścia fazowe i reorientacja molekularna w wybranych krystalicznych jonowych związkach koordynacyjnych z dynamicznym orientacyjnym nieuporządkowaniem”

7.2. Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

H1. A. Migdał-Mikuli, K. Hołderna-Natkaniec, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk***¹, I. Natkaniec, *Phase transitions and NH₃ motions in [Zn(NH₃)₄](ClO₄)₂ studied by incoherent neutron scattering and ¹H NMR methods*, Chem. Phys. **335** (2007) 187-193.
IF₂₀₀₇ = 1.805²; cyt. 4/5³ Punktacja MNiSW (lista A) = 25

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 35%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie pomiarów neutronowych, napisanie części manuskryptu dotyczącej metod neutronowych wraz z przygotowaniem rysunków, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H2. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk***, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, I. Natkaniec, *Phase transition in [Ca(NH₃)₆](ClO₄)₂ studied by neutron scattering methods and far infrared spectroscopy*, J. Alloy Compd. **509** (2011) 6545–6550.
IF₂₀₁₁ = 2.289; cyt. 9/10 Punktacja MNiSW (lista A) = 35

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 50%. Wkład ten obejmował zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie pomiarów neutronowych, napisanie części manuskryptu dotyczącej metod neutronowych wraz z przygotowaniem rysunków, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H3. **Ł. Hetmańczyk***, N. Górską, J. Hetmańczyk, E. Mikuli, I. Natkaniec, *Phase transitions in [Co(NH₃)₆](ClO₄)₃ investigated by neutron scattering methods*, Chem. Phys. **412** (2013) 1–6.
IF₂₀₁₃ = 2.028; cyt. 1/1 Punktacja MNiSW (lista A) = 25

¹ Symbolem* zaznaczono autora korespondującego

² Impact Factor (IF) podano z roku wydania.

³ Źródło: Web of Knowledge/SCOPUS na dzień 20 października 2016 r.

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 60%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie pomiarów neutronowych, przygotowanie rysunków, napisanie manuskryptu, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H4. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, *Thermal properties of polycrystalline $[Mn(NH_3)_6](ClO_4)_2$. Crystal structure and phase transitions*, J. Therm. Anal. Calorim. **118** (2014) 1049–1056.

IF₂₀₁₄ = 2.042; cyt. 2/4

Punktacja MNiSW (lista A) = 25

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 50%. Wkład ten obejmował opracowanie danych X-ray, wykonanie i opracowanie pomiarów DSC, napisanie części manuskryptu, współudział w przygotowaniu odpowiedzi na uwagi recenzentów dotyczących części przeze mnie opracowywanych.

H5. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, *Vibrations and reorientations of NH_3 molecules in $[Mn(NH_3)_6](ClO_4)_2$ studied by Infrared spectroscopy and theoretical (DFT) calculations*, Spectrochim. Acta A **136** (2015) 1515–1522.

IF₂₀₁₅ = 2.353; cyt. 2/3

Punktacja MNiSW (lista A) = 30

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 40%. Wkład ten obejmował wykonanie i opracowanie pomiarów IR, analizę temperaturowej zależności szerokości pasm w zakresie środkowej podczerwieni, napisanie części manuskryptu, współudział w przygotowaniu odpowiedzi na uwagi recenzentów dotyczących części przeze mnie opracowywanych.

H6. **Ł. Hetmańczyk***, J. Hetmańczyk, *Dynamics of NH_3 ligands and ClO_4^- anions in the phase transition in $[Cd(NH_3)_6](ClO_4)_2$ studied by x-ray powder diffraction, neutron scattering methods and infrared spectroscopy*, J. Phys. Chem. Solids **101** (2017) 34–44. DOI: 10.1016/j.jpcs.2016.10.006.

IF₂₀₁₆ = 2.048; cyt. 0/0

Punktacja MNiSW (lista A) = 25

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 80%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie większości pomiarów (rozpraszanie neutronów i widm IR), przygotowanie rysunków i tabel, napisanie manuskryptu, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H7. **Ł. Hetmańczyk***, J. Hetmańczyk, *Comparison of vibrational dynamics, thermal behaviour and phase transition in $[Ni(NH_3)_4](ReO_4)_2$ and $[Ni(NH_3)_6](ReO_4)_2$* , J. Therm. Anal. Calorim. **119** (2015) 1415–1428.

IF₂₀₁₅ = 2.042; cyt. 5/5

Punktacja MNiSW (lista A) = 25

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 70%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie większości pomiarów (poza opracowaniem pomiarów TG wykonanych przy różnych tempach ogrzewania), przygotowanie czterech rysunków, napisanie manuskryptu (poza częścią dot. wyznaczenia energii aktywacji dla dysocjacji NH_3), korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H8. Ł. Hetmańczyk*, J. Hetmańczyk, *Phase transition and NH₃ dynamics in [Ni(NH₃)₄](ReO₄)₂ studied by infrared absorption, X-ray powder diffraction and neutron scattering methods*, Chem. Phys. **469-470** (2016) 9-15.

IF₂₀₁₆ = 1.758; cyt. 0/1

Punktacja MNiSW (lista A) = 25

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 80%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie większości pomiarów, przygotowanie rysunków, napisanie manuskryptu, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H9. Ł. Hetmańczyk*, J. Hetmańczyk, *Phase transition, thermal dissociation and dynamics of NH₃ ligands in [Cd(NH₃)₄](ReO₄)₂*, Spectrochim. Acta A **164** (2016) 24–32. DOI:

10.1016/j.saa.2016.03.045.

IF₂₀₁₆ = 2.653; cyt. 0/1

Punktacja MNiSW (lista A) = 30

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 70%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie większości pomiarów (za wyjątkiem opracowania pomiarów TG wykonanych przy różnych tempach ogrzewania oraz analizy zależności temperaturowych dla pasma RS związanego z anionem), przygotowanie sześciu rysunków, napisanie manuskryptu, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H10. Ł. Hetmańczyk*, J. Hetmańczyk, *Phase transition and dynamics of NH₃ ligands in [Zn(NH₃)₄](ReO₄)₂*, Vib. Spectrosc. **86** (2016) 40–49.⁴

IF₂₀₁₆ = 1.682; cyt. -/0

Punktacja MNiSW (lista A) = 25

Swój wkład w powstanie tej pracy oceniam na 80%. Wkład ten obejmował koncepcję pracy, zaplanowanie, zrealizowanie i opracowanie większości pomiarów (za wyjątkiem opracowania pomiarów TG wykonanych przy różnych tempach ogrzewania), przygotowanie siedmiu rysunków, napisanie manuskryptu, korespondencję z edytorem i przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

7.3. Opis osiągnięcia naukowego

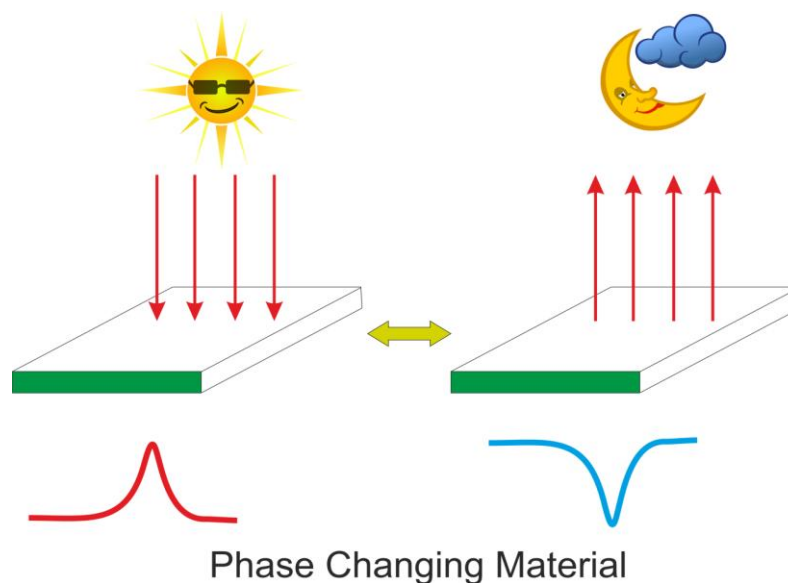
7.3.1. Wprowadzenie

Występowanie tego samego związku w różnych fazach czyli jego polimorfizm jest niezwykle ciekawym zjawiskiem. Jak powszechnie wiadomo odmiany polimorficzne mogą charakteryzować się diametralnie różnymi własnościami fizykochemicznymi. Znacomitym przykładem, świetnie ilustrującym tę różnorodność własności optycznych, elektrycznych, wytrzymałościowych itd. są odmiany polimorficzne węgla: diament, grafit, grafen. Polimorfizm ma ogromne znaczenie w badaniach materiałowych oraz w poszukiwaniu materiałów o nowych, pożądanych własnościach. Odgrywa także olbrzymią rolę w naukach

⁴ Publikacja jeszcze nie ujęta w bazie Web of Science

biologicznych i farmaceutycznych. Znane są bowiem przykłady wpływu polimorfizmu na aktywność biologiczną danego związku. Wpływ ten jest nawet bardziej widoczny w farmaceutykach. Ten sam związek, ale występujący w różnych strukturach może przejawiać własności lecznicze, ale jego inna forma może być nieaktywna lub, co gorsze w skrajnym przypadku mieć działanie szkodliwe. Już z powyższego, bardzo krótkiego i pobieżnego przeglądu widać, że badania polimorfizmu są ważne i interesujące nie tylko z naukowego punktu widzenia (poznanie własności fizykochemicznych, różne struktury krystaliczne i towarzyszące im zmiany dynamiki atomów), ale także mają niezwykle istotne znaczenie praktyczne, w konkretnych zastosowaniach.

W niniejszym autoreferacie omówiono badania przemian fazowych w szeregu związków kompleksowych. Główny nacisk położony został na zmiany dynamiki reorientacyjnej i wibracyjnej towarzyszące wykrytym przejściom fazowym. Niewątpliwie uzyskane w omawianych pracach rezultaty zaliczyć należy do badań podstawowych. Jednak znaczne zmiany entalpii towarzyszące obserwowanym przejściom mogą znaleźć także potencjalne zastosowania praktyczne. Związki tego typu jak omawiane w niniejszym autoreferacie można wykorzystać jako akumulatory energii cieplnej tzw. Phase Changing Materials. Zasada działania takiego układu jest bardzo prosta a została schematycznie zilustrowana na rys. 1. W momencie kiedy w otoczeniu dostępna jest wystarczająca ilość energii cieplnej, układ jest w stanie ją zaabsorbować w trakcie odwracalnej przemiany fazowej i zgromadzić przechodząc do nowej fazy. Z punktu widzenia zastosowań praktycznych ważne jest aby przemiana taka była związana z dużą wartością zmiany entalpii przypadającą na jednostkową masę. Kolejnym czynnikiem niezbędnym do realnego wykorzystania tego zjawiska jest wymóg aby transformacja zachodziła w okolicy temperatury pokojowej lub nieco powyżej. W czasie kiedy temperatura otoczenia ulega obniżeniu następuje przemiana fazowa, tym razem w kierunku odwrotnym do pierwotnego procesu i zgromadzona energia ulega uwolnieniu a związek przechodzi do swojej fazy niskotemperaturowej. Oczywiście, aby zjawisko takie mogło być praktycznie wykorzystywane, niezbędna jest trwałość takiego materiału, to jest musi on być zdolny do wielokrotnego przechodzenia z jednej fazy do drugiej bez zauważalnej degradacji. Niemniej ważna jest także stabilność termiczna, zwłaszcza w podwyższonych temperaturach.



Rys. 1. Schemat wykorzystania PCM jako akumulatorów ciepła.

7.3.2. *Przedmiot i cel badań*

Przedmiotem badań były jonowe związki koordynacyjne (9 związków), głównie metali 3d elektronowych. Wszystkie badane połączenia zawierały ten sam ligand (molekuły NH_3) przy czym liczba koordynacji wynosiła cztery lub sześć. Anionem były tetraedryczne molekuły jonu chloranowego(VII) lub jonu renianowego(VII). Badania połączeń, w którym występuje anion chloranowy(VII) były prowadzone już od pewnego czasu. Celem niniejszego opracowania było uzupełnienie wiedzy dla tych związków z anionem ClO_4^- , które jeszcze nie zostały przebadane. Natomiast polimorfizm związków zawierających w swej budowie anion renianowy(VII) został poznany i przeanalizowany po raz pierwszy. Takie podejście stworzyło doskonałe warunki do porównania wpływu anionu (w obu przypadkach tetraedrycznego) na własności fizykochemiczne podobnych związków koordynacyjnych. Omawiane połączenia mają szereg cech wspólnych. W temperaturze pokojowej większość ze wspomnianych związków krystalizuje w układzie regularnym, przy czym dwie grupy przestrzenne są najbardziej popularne. Kompleksy o liczbie koordynacji sześć krystalizują przeważnie w grupie Fm-3m (Nr 225) natomiast w przypadku kompleksów o liczbie koordynacji cztery najczęściej spotyka się grupę F-43m (Nr 216). Kolejną cechą wspólną, łączącą omawiane połączenia było występowanie w nich przemian fazowych w ciele stałym. Dodatkową, interesującą przesłanką do badania tych związków była obecność w nich dynamicznego orientacyjnego nieporządku zarówno w samym kationie kompleksowym jak i anionie.

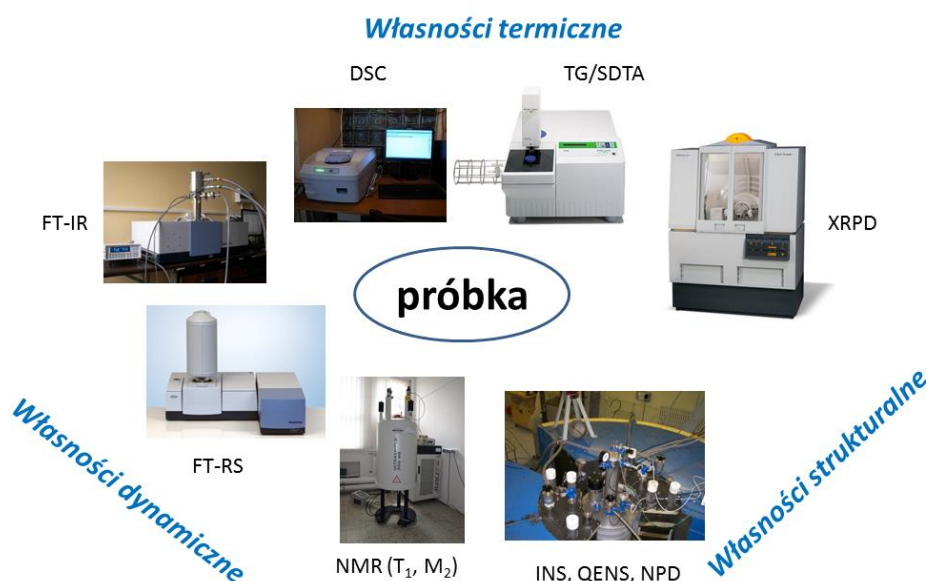
Głównym celem prowadzonych badań było poznanie polimorfizmu tych związków koordynacyjnych, scharakteryzowanie wykrytych w nich (w ramach ciała stałego) przejść fazowych, wyznaczenie temperatur i zmian entalpii oraz entropii tych przemian oraz powiązanie ich ze zmianami dynamiki reorientacyjnej i wibracyjnej. Kolejnym celem było także śledzenie zmian struktury krystalicznej towarzyszących omawianym przemianom.

7.3.3. *Stosowane metody badawcze*

Do zrealizowania postawionych celów wykorzystano szereg komplementarnych metod badawczych. Na podkreślenie zasługuje fakt, że większość pomiarów przeprowadzano w funkcji temperatury. Stosowane metody eksperymentalne w skrócie można podzielić na trzy zasadnicze grupy pozwalające badać odpowiednio własności termiczne, dynamiczne i strukturalne. Rysunek 2 przedstawia schematycznie wykorzystywane metody badawcze. Wśród metod wykorzystywanych do analizy własności termicznych jako wiodącą należy wskazać różnicową kalorymetrię skaningową (DSC). Służyła ona do szybkiego przeanalizowania sytuacji fazowej w badanych próbkach oraz określenia temperatur przejść fazowych i towarzyszących im zmian entalpii i entropii. Istotną częścią omawianej pracy było także określenie trwałości i stabilności termicznej badanych kompleksów w szerokim zakresie temperatur. Do realizacji tego celu stosowano metody analizy termogravimetrycznej (TG).

Drugą istotną grupę stanowiły metody wykorzystywane do badania dynamiki ligandów i/lub anionów. Stosowano w tym przypadku analizę temperaturowej zależności kształtu, odpowiednio wybranego, pasma w oscylacyjnych widmach w zakresie podczerwieni i widm ramanowskiego rozpraszania światła. Badane połączenia zawierają stosunkowo dużą liczbę atomów wodoru. W związku z tym całkowicie naturalnym wydaje się zastosowanie metody magnetycznego rezonansu jądrowego (protonowego) oraz metod rozpraszania neutronów (nieelastycznego i/lub kwazielastycznego rozpraszania, zwłaszcza biorąc pod uwagę znaczny w porównaniu z innym pierwiastkami przekrój czynny na takie rozpraszane dla atomu wodoru) w zastosowaniu do śledzenia zmian w dynamice ligandów.

Wreszcie ostatnią, trzecią stosowaną grupę stanowiły metody dyfrakcji promieni X (XRPD) i neutronów (ND). Dawały one możliwość analizy ewentualnych zmian struktury krystalicznej w przejściu fazowym. Ponieważ w trakcie syntezy uzyskiwano materiał polikrystaliczny, stąd też pomiary dyfrakcyjne wykonywane były głównie dla próbek proszkowych.



Rys. 2. Podział i stosowane w pracy metody badawcze.

7.3.4. Omówienie głównych rezultatów

W rozdziale tym omówione zostaną najważniejsze rezultaty uzyskane w publikacjach naukowych wchodzących w skład osiągnięcia naukowego będącego podstawą wniosku habilitacyjnego. Jak już wspomniano wcześniej uzyskany materiał dotyczy związków, w których występują dwa tetraedryczne aniony: ClO_4^- lub ReO_4^- . Publikacje zostały pogrupowane właśnie ze względu na anion stąd też nie zawsze zachowany został porządek chronologiczny opublikowanych prac. Jako pierwsze omówione zostaną kompleksy, w których obecne są aniony chloranowe(VII), w dalszej zaś kolejności przedstawione zostaną wyniki uzyskane dla renianów(VII).

H1 $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$

W temperaturze pokojowej chloran(VII) tetraaminacyнку(II) krystalizuje w układzie regularnym, w grupie przestrzennej F-43m (Nr 216) [1]. Kation kompleksowy podobnie jak anion mają budowę tetraedryczną. W strukturze można wyróżnić dwa typy anionów. Jeden rodzaj umieszczony jest w utworzonych przez kationy lukach tetraedrycznych. Drugi typ anionów znajduje się w lukach oktaedrycznych. W strukturze obecna jest także sieć wiązań wodorowych.

W pracy [2] wykryto metodą DSC, że w związku $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4(\text{ClO}_4)_2]$ występują dwa przejścia fazowe w temperaturach odpowiednio 273.5 K i 164.8 K. Fakt ten stanowił przyczynek do dalszych, głębszych badań. Celem ich było określenie ewentualnych zmian zachodzących w dynamice ligandów NH_3 w okolicy wykrytych przemian. Zmiany dynamiki NH_3 śledzono wykorzystując kwazielastyczne rozpraszanie neutronów. Pomiary te (podobnie jak dla wszystkich pozostałych próbek) przeprowadzono na spektrometrze NERA [3] zainstalowanym przy impulsowym reaktorze IBR-2 w Zjednoczonym Instytucie Badań Jądrowych w Dubnej (Rosja). Spektrometr NERA jest spektrometrem czasu przelotu (odległość moderator – próbka to ok. 110 m), pracującym w tzw. odwrotnej geometrii. Pozwala to na jednoczesne badanie efektów zarówno nieelastycznych (widma INS; dla tych badań jest on zoptymalizowany) jak i elastycznych (dyfrakcja, ND). Mimo, że próbki, o których mowa w niniejszym referacie zawierają dużo atomów wodoru i uzyskiwane neutronogramy nie są najwyższej jakości (głównie z powodu niekoherentnego rozpraszania) to pomiary dyfrakcyjne są niezwykle ważne i użyteczne. Pozwalają one bowiem śledzić ewentualne zmiany struktury krystalicznej zachodzące przy zmianach temperatury. Widma INS/QENS zarejestrowano w dziewięciu temperaturach: 18, 40, 50, 75, 100, 155, 175, 250 oraz 290 K. Kwazielastyczne poszerzenie pojawiające się w temperaturze 75 K i wyższych było analizowane stosując model przeskoków o kąt 120° . Wykazano, że ligandy NH_3 wykonują w zakresie temperatur 75 – 290 K szybkie ruchy reorientacyjne wokół swojej osi trójkratnej. Ruch ten jest jedynie nieznacznie zaburzony w przejściu fazowym $T_{C2} \approx 165$ K. Na podstawie sporządzonych zależności arrheniusowskich wyznaczone zostały energie aktywacji dla tego ruchu. Wynoszą one odpowiednio $2.5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ w fazie wysokotemperaturowej i pośredniej oraz $1.7 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ w fazie niskotemperaturowej.

Ruchy grup NH_3 jak również całego kationu badane były także z wykorzystaniem analizy drugiego momentu linii NMR. Z pomiarów tych wypływają następujące wnioski. W temperaturze 90 K (najniższa dostępna w pomiarach NMR) sieć nie jest sztywna. Obserwowana eksperymentalnie wartość drugiego momentu linii odpowiada reorientacji czterech ligandów NH_3 wokół swojej osi trójkratnej. Z ruchem tym związana jest energia aktywacji oszacowana na ok. $3 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Nieznacznie powyżej T_{C2} obserwowany spadek wartości drugiego momentu linii związany jest z uruchomieniem anizotropowej reorientacji całego kationu kompleksowego wokół osi trójkratnej. Z ruchem tym związana jest energia aktywacji rzędu $22 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

H₂ [Ca(NH₃)₆](ClO₄)₂

Omawiany związek został uzyskany na drodze tzw. suchej syntezy. Kilka gramów Ca(ClO₄)₂·H₂O zostało umieszczone w kwarcowej rurze, która była ogrzewana do ok. 100°C. Po upływie kilku godzin przez rurę przepuszczano gazowy amoniak, cały czas ogrzewając. Po kilkunastu godzinach prowadzenia reakcji powstał biały pulchny proszek. Wyłączono wtedy ogrzewanie przestrzeni reakcyjnej, ale w dalszym ciągu przepuszczano nad próbką gazowy NH₃. Po upływie kolejnych kilkunastu godzin powstałą próbkę umieszczono w eksykatorze. Z pomiarów dyfrakcji promieni X wynika, że chloran(VII) heksaaminawapnia krystalizuje w temperaturze pokojowej w układzie regularnym (grupa przestrzenna Fm-3m, 225) [4]. Metodą DSC zostało wykryte w tym kompleksie jedno niskotemperaturowe przejście fazowe w temperaturze 123.3 K (podczas ogrzewania) [5].

Dynamikę grup NH₃ w szerokim zakresie temperatur, podobnie jak w omawianym wyżej przypadku, badano za pomocą nieelastycznego i kwazielastycznego rozpraszania neutronów. Natomiast zmiany strukturalne śledzono wykorzystując dyfrakcję neutronów. Ruch reorientacyjny grup NH₃ jest doskonale opisywany przez model natychmiastowych przeskoków o kąt 120°. Nie obserwuje się istotnego zaburzenia tego ruchu w okolicach zarejestrowanej przemiany fazowej. Ligandy NH₃ reorientują szybko z czasem korelacji rzędu pikosekund zarówno w fazie wysoko jak i niskotemperaturowej. Z zależności szerokości poszerzenia kwazielastycznego od temperatury oszacowano energię aktywacji dla takiego ruchu. Jest on bardzo mała i wynosi ok. 1.2 kJ·mol⁻¹. Dynamiczny orientacyjny nieporządek ligandów znajduje swoje odzwierciedlenie także w widmie nieelastycznie rozproszonych neutronów. Widma zmierzone w temperaturze 110 K i wyższych wykazują znaczne rozmycie. Dopiero na widmie zebrany w 25 K widoczne są ostre, wyraźne maksima.

Ciekawe wyniki uzyskano natomiast z pomiarów dyfrakcji neutronów. Jak wspomniano wcześniej w temperaturze pokojowej [Ca(NH₃)₆](ClO₄)₂ krystalizuje w układzie regularnym. Mimo wielu podjętych prób nie udało się wykonać pomiarów rentgenowskich (próbka na płaskim uchwycie) dla fazy niskotemperaturowej. Okazuje się bowiem, że uzyskany kompleks jest stosunkowo nietrwały i dość łatwo odszczepia ligandy NH₃ zwłaszcza w obecności próżni niezbędnej do wykonania pomiarów w niskich temperaturach. Próby zabezpieczania związku przed wpływem próżni za pomocą różnych lakierów czy klejów również zakończyły się niepowodzeniem. Związek reagował ze składnikami tych zabezpieczających warstw. Natomiast pomiary neutronowe przeprowadzane były dla próbki zamkniętej szczelnie w kasecie wykonanej z cienkiej folii aluminiowej. Okazuje się, że takie zabezpieczenie jest wystarczające do ochrony przed negatywnym wpływem czynników

zewnątrznych. Zmierzony w 131 K neutronogram jest charakterystyczny dla wysoko symetrycznej, regularnej fazy. Natomiast po obniżeniu temperatury do 110 K obserwowana jest znaczna zmiana obrazu dyfrakcyjnego polegająca na rozszczepieniu jednego z refleksów. Co ważniejsze zmiana ta jest w pełni odwracalna. Zatem pomiary dyfrakcji neutronów dobitnie wskazują na strukturalny charakter wykrytego metodą DSC przejścia fazowego. Niestety na podstawie uzyskanych rezultatów możliwe było tylko przeprowadzenie analizy jakościowej. Nie udało się natomiast, najprawdopodobniej ze względu na stosunkowo niską jakość neutronogramów, wyindeksować refleksów obecnych w fazie niskotemperaturowej. Niemożliwe było zatem określenie do jakiego układu krystalicznego transformuje się $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$. Niemniej jednak przykład ten wskazuje, że możliwość rejestrowania jednoczesnego efektów dyfrakcyjnych i nieelastycznych ma bardzo duże znaczenie. Nie tylko bowiem pozwala na jakościowe śledzenie zmian strukturalnych poszczególnych faz, ale także daje możliwość potwierdzenia, że użyty związek nie uległ destrukcji w czasie pomiarów.

H3 [Co(NH₃)₆](ClO₄)₃

Chloran(VII) heksaaminakobaltu(III) jest jedynym spośród prezentowanych połączeń, w którym metal centralny występuje na trzecim stopniu utlenienia. Inspiracją do podjęcia badań tego związku była praca [6]. Metodą kalorymetrii adiabatycznej wykryto trzy przejścia fazowe typu porządek-nieporządek w następujących temperaturach: $T_{C1} = 334.2$ K, $T_{C2} = 111.7$ K, $T_{C3} = 97.6$ K. Pomiary dyfrakcji promieni X wykonane dla próbki monokrystalicznej wykazały, że powyżej T_{C1} (faza I) związek krystalizuje w układzie regularnym (grupa przestrzenna Fm-3m) przy czym w strukturze obecne są dwa rodzaje nieuporządkowanych anionów. W fazie II ($T_{C2} < T < T_{C1}$) część anionów ulega uporządkowaniu natomiast w części kationów obserwuje się zniekształcenie regularnego dotąd oktaedru. Związek krystalizuje nadal w układzie regularnym, ale symetria ulega obniżeniu do grupy przestrzennej Ia-3 [6].

Interesującym zatem wydawało się wykorzystanie metod rozpraszania neutronów do zbadania dynamiki grup NH_3 i ewentualnych jej zmian w okolicach przejść fazowych. Pomiary wykonano w zakresie temperatur 277 – 20 K. Reorientacje molekuł NH_3 analizowano stosując model natychmiastowych przeskoków o kąt 120° . W zakresie temperatur 112 – 277 K model ten dobrze opisuje dynamikę protonów w NH_3 , która odbywa się z czasem korelacji rzędu pikosekund. Elastyczny niespójny czynnik struktury (EISF) oscylował wokół wartości 0.5 i zgadzał się dobrze z wyliczonym teoretycznie. Można zatem stwierdzić, że w szerokim zakresie temperatur nie obserwuje się istotnych zmian czy zaburzeń

w dynamice grup NH_3 . Natomiast interesujące rezultaty uzyskano dla temperatury 80 K czyli poniżej przejścia fazowego wyznaczonego w T_{C3} . Okazało się bowiem, że w tej temperaturze wyznaczony czynnik EISF jest znacznie większy niż dla pozostałych temperatur. Wskazywało to na pewien nadmiar elastyczności spowodowany faktem, że nie wszystkie protony reorientowały dostatecznie szybko by dawać wkład w poszerzenie kwazielastyczne. Uzyskane wyniki wskazywały jednoznacznie, że część protonów można traktować jako nieruchomą (z punktu widzenia metody QENS i odpowiadającego jej tzw. okienka czasowego) i wnoszącą swój wkład jedynie do części elastycznej. W temperaturze 80 K przeprowadzono ponownie analizę danych QENS tym razem uwzględniającą fakt, że tylko część protonów jest mobilna. Najlepszą zgodność między eksperymentalnie i teoretycznie wyznaczonym czynnikiem EISF uzyskano przy założeniu, że tylko połowa ligandów NH_3 reorientuje szybko, podczas gdy pozostałą połowę można uznać za nieruchomą i dającą wkład tylko do części elastycznej prawa rozpraszania.

Z zależności szerokości poszerzenia kwazielastycznego od temperatury możliwe było oszacowanie energii aktywacji na ruch NH_3 . Analizę przeprowadzono tylko dla danych uzyskanych powyżej 80 K. Wyznaczona energia aktywacji jest mała (ok. $1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$), ale jest porównywalna z wartościami uzyskanymi dla innych podobnych związków.

Pomiary dyfrakcji neutronów przeprowadzone na próbce proszkowej nie wykazały istotnych zmian w strukturze krystalicznej.

H4, H5 [Mn(NH₃)₆](ClO₄)₂

Badany związek został zsyntetyzowany na tzw. drodze suchej według analogicznej procedury jak opisana dla $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$. Mimo wielokrotnych prób nie udało się wyizolować zupełnie czystego produktu syntezy. Zawsze głównej fazie towarzyszyły domieszki. Zauważono przy tym, że skład otrzymanego związku ulega zmianom w czasie. Wzrasta ilość zanieczyszczeń kosztem fazy $[\text{Mn}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ a jednocześnie obserwuje się zmianę barwy w kierunku coraz ciemniejszej. Niestabilność uzyskanego połączenia wynika niewątpliwie z jednej strony z silnych własności utleniających anionu chloranowego(VII) z drugiej zaś strony z możliwości utlenienia Mn do wyższych stopni utlenienia. Za powstawanie ciemnej barwy odpowiada zapewne powstawanie brunatnego tlenku manganu(IV). Pomimo opisanych powyżej trudności w otrzymaniu związku w czystej postaci, udało się dla świeżo spreparowanego kompleksu wyznaczyć strukturę krystaliczną w temperaturze pokojowej. Okazało się, że badana próbka zawiera nieznaczące domieszki chloranu(VII) amonu natomiast sam chloran(VII) heksaaminamanganu(II) krystalizuje w

układzie regularnym w grupie przestrzennej Fm-3m popularnej dla wielu heksaamina kompleksów metali dwuwartościowych. Parametr stałej sieci wynosi 11.5729 Å. Zależność temperatury przejścia fazowego od parametru sieci znakomicie koreluje z takimi zależnościami wyznaczonymi dla innych chloranów(VII) heksaaminametali(II).

Metodą DSC wykryto jedno niskotemperaturowe przejście fazowe w temperaturze 143. K. Z przemianą tą związany jest znaczny efekt cieplny wynoszący ok. 3.1(2) kJ·mol⁻¹ oraz duża zmiana entropii ($\Delta S=21.6(3)$ J·mol⁻¹·K⁻¹). Tak duża zmiana entropii świadczy o tym, że wysokotemperaturowa faza jest orientacyjnie dynamicznie nieuporządkowana. Temperaturowa histereza obserwowanej przemiany fazowej wynosząca 5.9 K wskazuje z kolei na to, że jest to przemiana pierwszego rodzaju. Wykonano także pomiary dyfrakcji promieni X w temperaturze 100 K. Obraz dyfrakcyjny ulega zasadniczej zmianie w porównaniu do rezultatów uzyskanych w temperaturze pokojowej. Niestety nie udało się przeprowadzić wskaźnikowania tego dyfraktogramu. Niemniej jednak obserwowane zmiany jednocześnie świadczą o tym, że w wykrytym przejściu fazowym zachodzi istotna zmiana struktury krystalicznej.

Temperaturowa ewolucja pasm zarejestrowanych na widmie w zakresie podczerwieni potwierdza strukturalny charakter przemiany fazowej. Poniżej T_C widoczne jest pojawianie się nowych pasm.

Rozkład termiczny [Mn(NH₃)₆](ClO₄)₂ badany był za pomocą metody DSC i TG. Proces odszczepiania ligandów NH₃ zachodzi w trzech etapach. W pierwszym, rozpoczynającym się już ok. 400 K oderwaniu ulegają dwie molekuly NH₃. Podczas dalszego ogrzewania kolejne dwa ligandy NH₃ ulegają oderwaniu. Wreszcie ok. 538 K obserwuje się wybuchowy rozkład kompleksu zawierającego jeszcze pewną ilość NH₃.

Z uwagi na niestabilność omawianego związku nie wykonano dla niego pomiarów rozpraszania neutronów. Natomiast zmiany dynamiki ligandów NH₃ były śledzone za pomocą analizy kształtu wybranych pasm na widmie IR. Z temperaturowej zależności szerokości pasm związanych z drganiem rozciągającym N-H oraz drganiem rocking wynika, że ligandy reorientują szybko (czas korelacji rzędu pikosekund) zarówno w fazie wysoko jak i niskotemperaturowej. Nie obserwuje się istotnego zaburzenia tego ruchu w okolicy przejścia fazowego. Wyznaczona energia aktywacji wynosi ok. 4.5 kJ·mol⁻¹ w fazie niskotemperaturowej i ok. 7.8 kJ·mol⁻¹ w fazie wysokotemperaturowej.

Eksperymentalne widma w zakresie IR zostały także porównane z obliczonymi teoretycznie dla dwóch modeli. W pierwszym modelu widma zostały policzone metodą DFT osobno dla izolowanego kationu [Mn(NH₃)₆]²⁺ i anionu ClO₄⁻ przy wykorzystaniu pakietu

Gaussian09 [7]. W drugim modelu obliczenia przeprowadzono dla układu $[\text{Mn}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ to jest składającego się kationu i dwóch otaczających go anionów. W modelu drugim uzyskano lepszą zgodność z widmem doświadczalnym.

***H6* $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$**

Badania tego związku stanowią kontynuację i rozwinięcie wcześniejszych moich badań opublikowanych w pracy [8]. $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ został otrzymany na drodze tzw. syntezy suchej opisanej już powyżej. W pracy [8] określono za pomocą metody DSC temperaturę przejścia fazowego $T_C = 138.9$ K. W obecnym opracowaniu podjęto próby zbadania zmian dynamiki ligandów i anionów oraz struktury krystalicznej towarzyszące wykrytemu uprzednio przejściu fazowemu. Struktura krystaliczna w temperaturze pokojowej dla tego połączenia jest znana z danych literaturowych [9]. Związek krystalizuje w grupie przestrzennej Fm-3m. W celu sprawdzenia jakości zsyntetyzowanego preparatu wykonano badania dyfrakcji promieni X. Obraz dyfrakcyjny dawał się wywskaźnikować w układzie regularnym, a analiza wygaszeń systematycznych potwierdziła, że grupą przestrzenną jest Fm-3m. Ponieważ w literaturze nie znaleziono danych dotyczących pełnej struktury krystalicznej tj. nie były wyznaczone położenia poszczególnych atomów podjęto się rozwiązywania struktury i uściślenia metodą Rietvelda danych dyfrakcyjnych uzyskanych z pomiarów proszkowych. W wyniku procesu uściślenia otrzymano bardzo duże czynniki temperaturowe dla atomów tlenu, świadczące o nieuporządkowaniu anionów. W związku z tym na podstawie danych literaturowych zaproponowano model takiego nieuporządkowania.

Wykonane pomiary dyfrakcji neutronów i promieni X dla fazy niskotemperaturowej (poniżej T_C) wykazały, że przejściu fazowemu towarzyszy znaczna zmiana struktury krystalicznej. Niestety nie udało się jednoznacznie wywskaźnikować refleksów i wyznaczyć komórki elementarnej i rozmieszczenia w niej atomów. Najprawdopodobniej wysokotemperaturowa regularna faza ulega transformacji do układu jednoskośnego.

Kolejnym interesującym celem było zbadanie dynamiki NH_3 w obu fazach. Wykorzystano do tego kwazielastyczne rozpraszanie neutronów. Uzyskane rezultaty można przedstawić następująco. Ligandy NH_3 reorientują szybko w obu fazach, przy czym ruch ten jest dobrze opisywany modelem przeskoków o duże kąty.

Dynamikę reorientacyjną anionów śledzono wykorzystując analizę kształtu pasm w widmach IR. Stwierdzono, że aniony reorientują szybko mniej więcej do temperatury ok. 150 K czyli blisko zarejestrowanej przemiany fazowej. Poniżej tej temperatury szerokość pasma nie ulega zmianie. Oszacowana energia aktywacji dla reorientacyjnego ruchu anionów wynosi

ok. 17(2) kJ·mol⁻¹. Warto w tym miejscu nadmienić, że na widmach IR obserwuje się trzy blisko siebie leżące i o małej intensywności maksima (zakres 950 – 920 cm⁻¹) odpowiadające drganiu pełnosymetrycznemu (oddychającemu) w anionie ClO₄⁻. Fakt ten przemawia za występowaniem nieuporządkowania anionów. To nieuporządkowanie i jego ewentualne zamrożenie w fazie niskotemperaturowej może być przyczyną nieudanego indeksowania refleksów w fazie utworzonej poniżej przejścia fazowego. Obserwowane na widmach IR zmiany (rozszczerzenia, pojawianie się nowych pasm) bardzo dobrze korelują z wykrytym przejściem fazowym i potwierdzają dodatkowo jego strukturalny charakter.

H7, H8 [Ni(NH₃)₄](ReO₄)₂, [Ni(NH₃)₆](ReO₄)₂

Powyższe dwie publikacje rozpoczynają cykl prac dotyczących badań przemian fazowych w związkach zawierających w swojej budowie anion ReO₄⁻. W pracy oznaczonej jako H7 wykorzystując jako podstawowe metody badawcze metodę różnicowej kalorymetrii skaningowej oraz metodę termogravimetryczną przeprowadzono analizę własności termicznych obu kompleksów. Okazuje się, że [Ni(NH₃)₆](ReO₄)₂ jest niestabilny i łatwo przechodzi w związek o liczbie koordynacji cztery. Przemianie tej towarzyszy zmiana barwy z fioletowej na niebieską. Oba kompleksy mają bardzo podobne widma w zakresie środkowej podczerwieni. Jediną różnicą między widmami jest obecność dodatkowego pasma przy ok. 1411 cm⁻¹ w przypadku [Ni(NH₃)₄](ReO₄)₂. Niestabilność kompleksu o liczbie koordynacji sześć jest dość nieoczekiwana, bowiem analogiczny kompleks, ale z anionem ClO₄⁻ cechuje się bardzo wysoką stabilnością. Nie zmienia on swojego składu nawet na przestrzeni wielu lat. Na podstawie widm, zwłaszcza w dalekiej podczerwieni udało się także wykazać, że w [Ni(NH₃)₆](ReO₄)₂ aniony renianowe(VII) mają strukturę zniekształconego tetraedru, podczas gdy w [Ni(NH₃)₄](ReO₄)₂ tworzą one coś na kształt polimerowych łańcuchów.

Metoda DSC pozwoliła wykryć jedno, o stosunkowo małej wartości ΔH przejście fazowe w związku [Ni(NH₃)₄](ReO₄)₂ w temperaturze 187.8 K (przy ogrzewaniu). Nie stwierdzono natomiast, żadnego niskotemperaturowego przejścia fazowego w związku renian(VII) heksaaminaniklu(II). Jest to kolejny zaskakujący wynik bowiem [Ni(NH₃)₆](ClO₄)₂ ma poniżej temperatury pokojowej aż dwa przejścia fazowe: tzw. duże i małe [10].

Oba omawiane związki rozkładają się w podobny sposób. Najpierw następuje stopniowa deaminacja, w zależności od badanego związku, zachodząca w dwóch lub trzech etapach. W każdym etapie odszczepiane są po dwie molekuly NH₃. Proces ten jest zakończony nieco powyżej 600 K. W zakresie temperatur 600 – 900 K utworzony Ni(ReO₄)₂

jest stabilny. Powyżej 1000 K ulega on dalszemu rozkładowi przy czym wydziela się Re_2O_7 i jako końcowy produkt rozkładu pozostaje NiO, który został zidentyfikowany metodą spektroskopii w zakresie dalekiej podczerwieni.

Kompleksy, w których występuje anion ReO_4^- w przeciwieństwie do ClO_4^- nie ulegają gwałtownemu, wybuchowemu rozkładowi. W związku z tym, możliwe było oszacowanie energii aktywacji dla poszczególnych etapów deaminacji z danych TG. Analizę danych przeprowadzono w oparciu o dwa modele: model Kissinger [11,12] i model Kissinger-Akahira-Sunose [13]. Uzyskano następujące energie aktywacji: 80, 100, 140 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ odpowiednio dla etapu I, II i III deaminacji.

Praca H8 dotyczyła badania wyłącznie $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ a to ze względu na fakt, że tylko ten związek ma niskotemperaturowe przejście fazowe. Do analizy tej przemiany wykorzystano analizę kształtu pasma w temperaturowych widmach IR, metody rozpraszania neutronów i dyfrakcji promieni X. Oszacowana z analizy kształtu pasma energia aktywacji dla ruchów NH_3 jest większa niż w przypadku związków z anionem ClO_4^- . Na widmach FT-MIR obserwuje się rozszczepienie niektórych pasm w okolicy przejścia fazowego. Świadczyć to może o strukturalnym charakterze omawianej przemiany. Przypuszczenia te potwierdzają pomiary dyfrakcyjne. Na dyfraktogramach zmierzonych w niskich temperaturach pojawiają się dodatkowe, w stosunku do fazy w temperaturze pokojowej, refleksy. Dynamika NH_3 była analizowana za pomocą kwazielastycznego rozproszenia neutronów. Wnioski wpływające z tych pomiarów są następujące: ligandy NH_3 reorientują z czasem korelacji rzędu pikosekund w obu fazach. Obserwuje się jedynie, co jest zrozumiałe, spowolnienie tego ruchu w miarę obniżania temperatury.

H9 $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$

$[\text{Cd}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ został otrzymany według procedury opisanej w literaturze na tzw. drodze mokrej, polegającej na wkrapłaniu wodnego roztworu NH_3 (stężenie 25%) do wodnego roztworu $[\text{Cd}(\text{H}_2\text{O})_x](\text{ReO}_4)_2$. Powstający, trudno rozpuszczalny kompleks został odsączony i wysuszony. Właściwy skład i czystość próbki potwierdziły badania dyfrakcyjne, spektroskopowe i termiczne.

W temperaturze pokojowej renian(VII) tetraaminakadmu(II) krystalizuje w układzie regularnym w grupie przestrzennej F-43m (Nr 216) [14]. W przeciwieństwie do analogicznych kompleksów, ale z anionem ClO_4^- badany związek nie ma przejść fazowych w zakresie temperatur 100 – 300 K. Natomiast metodą DSC udało się wykryć, po raz pierwszy,

jedno wysokotemperaturowe przejście fazowe ($T_C = 368.5$ K), któremu towarzyszy dość znaczny efekt cieplny wynoszący $1.9 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

Stabilność tego połączenia była badana z pomocą TG. Związek jest trwały do temperatury 400 K po czym rozkłada się podobnie jak omawiane wcześniej $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ i $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6](\text{ReO}_4)_2$. Wyróżnić można dwa zasadnicze etapy. Pierwszy związany z całkowitą deaminacją przy czym proces ten można podzielić na kolejne dwa etapy, w których odchodzą po dwa ligandy. Utworzony $\text{Cd}(\text{ReO}_4)_2$ jest stabilny w zakresie 600 – 1000 K po czym rozkłada się z wydzieleniem Re_2O_7 . Jako końcowy produkt pozostaje tlenek kadmu CdO . Oszacowano także podobnie jak w przypadku kompleksów niklu energię aktywacji na odszczepianie amoniaku. Wynosi ona ok. $100 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ dla każdego z etapów. Pomiar dyfrakcji promieni X wykonane na próbce proszkowej w temperaturach 90, 298, 415 K nie wykazały zmian strukturalnych w szerokim zakresie temperatur.

Ponieważ przemiana fazowa ma miejsce powyżej temperatury pokojowej to interesującym wydawało się zbadanie dynamiki ligandów NH_3 właśnie w fazie niskotemperaturowej, niezaburzonej żadnymi przemianami. Do osiągnięcia tego celu wykorzystano przede wszystkim analizę kształtu wybranych pasm w temperaturowych widmach w zakresie podczerwieni i widmach rozpraszania ramanowskiego. Ligandy NH_3 reorientują szybko aż do temperatury ok. 40 K. Poniżej tej temperatury obserwuje się jedynie relaksację wibracyjną. Wyznaczona na tej podstawie energia aktywacji na reorientację NH_3 jest niska i wynosi ok. $4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Podobne wnioski na temat reorientacji ligandów NH_3 dostarczają także metody rozpraszania neutronów. Kwazielastyczne rozpraszanie neutronów analizowane było tylko w sposób jakościowy z dwóch zasadniczych powodów. Pierwszym była mała ilość próbki wynikająca z dość kosztownej syntezy, drugim natomiast obecność jonów kadmu, który ma duży przekrój czynny na pochłanianie neutronów. Niemniej jednak nawet taki jakościowy obraz jest zgodny z wynikami uzyskanymi z metod spektroskopii IR i RS. Poszerzenie QENS widoczne jest w 150 K co świadczy, że molekuly NH_3 reorientują szybko nawet w stosunkowo niskich temperaturach. Poszerzenie to jest niewidoczne w temperaturze 50 K co znakomicie zgadza się z wynikami uzyskanymi z podczerwieni. Zatem zmiana anionu nie powoduje drastycznych zmian w reorientacji grup NH_3 . Reorientują one szybko i to do niskich temperatur w obu typach związków. Z ruchem tym związane są niskie bariery energii aktywacji.

Dyfrakcja neutronów nie wskazuje na jakiegokolwiek zmiany struktury krystalicznej w przedziale temperatur 300 – 150 K.

H10 [Zn(NH₃)₄](ReO₄)₂

Renian(VII) tetraaminacyнку(II) został otrzymany w sposób analogiczny jak [Cd(NH₃)₄](ReO₄)₂ opisany powyżej. Ponieważ liczba koordynacji w przypadku związków zawierających anion renianowy(VII) jak i chloranowy(VII) jest taka sama to pozwala to na bezpośrednie porównywanie tych związków i wyciąganie wniosków na temat wpływu anionu na własności fizykochemiczne. Omawiany związek krystalizuje w temperaturze pokojowej w układzie regularnym, w grupie przestrzennej F-43m. W sieci krystalicznej wyróżnić można zatem dwa rodzaje, nierównocennych anionów mających różne otoczenie. Jeden typ anionów zajmuje pozycje w lukach tetraedrycznych utworzonych przez kationy, podczas gdy drugi rodzaj anionów umiejscowiony jest w lukach oktaedrycznych także utworzonych przez kationy kompleksowe.

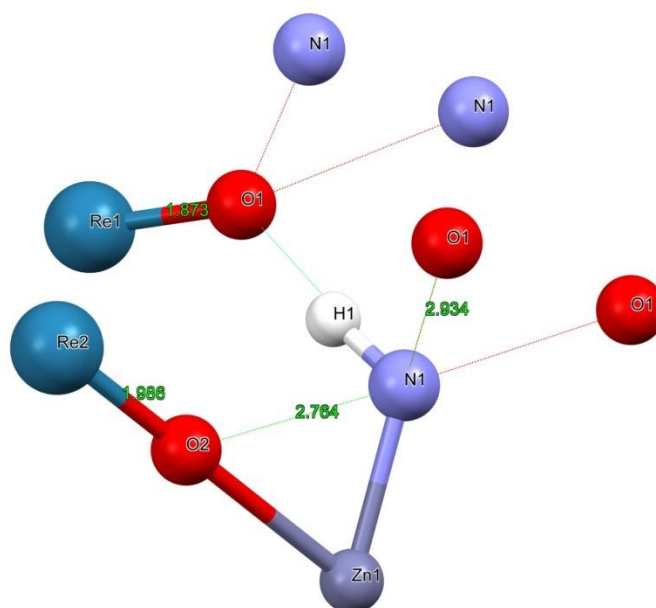
W zakresie temperatur 140 – 300 K nie stwierdzono obecności, żadnego przejścia fazowego. Jest to o tyle ciekawe, że [Zn(NH₃)₄](ClO₄)₂ ma w tym zakresie aż dwa przejścia fazowe (zob. H1). Natomiast podobnie jak w [Cd(NH₃)₄](ReO₄)₂ wykryto, po raz pierwszy, jedno wysokotemperaturowe przejście przy T_C = 393.5 K (przy ogrzewaniu). Rozkład tego związku zachodzi w podobny sposób jak w przypadku omawianego powyżej związku z kadmem jako atomem centralnym. Około 450 K zaczyna się dwustopniowy proces deaminacji, który kończy się nieco powyżej 600 K. Następnie utworzony Zn(ReO₄)₂ jest stabilny do około 900 K po czym obserwuje się znaczny ubytek masy związany z wydzieleniem Re₂O₇. Końcowym produktem jest tlenek cynku ZnO. Podobnie jak w przypadku [Cd(NH₃)₄](ReO₄)₂ także i dla [Zn(NH₃)₄](ReO₄)₂ wykonano badania termogravimetryczne mające na celu oszacowanie energii aktywacji dla procesu deaminacji. W obu etapach uzyskano wartość oscylującą około 100 kJ·mol⁻¹ wskazującą na równocennosc ligandów.

Pomiary dyfrakcji neutronów i promieni X wykazały, że regularna struktura nie ulega zmianom w szerokim zakresie temperatur (35 – 415 K).

Do badania dynamiki głównie ligandów w fazie niskotemperaturowej, niezaburzonej żadnymi przejściami fazowymi wykorzystano metodę spektroskopii w podczerwieni i metody rozpraszania neutronów. Z pomiarów kształtu pasma w widmie IR wynika, że ligandy NH₃ reorientują szybko aż do temperatury 80 K. Poniżej tej temperatury nie obserwuje się już zmian szerokości badanego pasma. Ruch ten odbywa się z niską energią aktywacji bo wynoszącą ok 2.3 kJ·mol⁻¹. Z kolei podobna analiza, ale wykonana dla pasma związanego z drganiem w anionie i widocznym na widmie RS wykazała, że aniony reorientują do około 150 K po czym następuje albo całkowite zahamowanie reorientacji albo ruch ten staje się na tyle

wolny, że wychodzi poza tzw. okienko czasowe metody. Wniosek ten jest zgodny z pojawiającymi się na widmie IR właśnie w okolicy 150 K słabymi pasmami przy ok. 2475 cm^{-1} a związanymi z formowaniem się dosyć silnego wiązania wodorowego N-H...O. Spowolnienie ruchu anionu stwarza możliwości do powstania silnego wiązania wodorowego. Rysunek 3 przedstawia część komórki elementarnej uzyskanej w procesie uściślenia metodą Rietvelda wraz z zaznaczonymi odległościami między atomami.

Widma oscylacyjne w IR i RS zostały także policzone metodą DFT dla izolowanego kationu i anionu. Okazuje się, że widma eksperymentalne mogą być z dobrym przybliżeniem oddane jako suma wkładów pochodzących od obu jonów.



Rys. 3. Widok części komórki elementarnej $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ wraz z zaznaczonymi odległościami międzyatomowymi.

7.3.5. Podsumowanie

Najważniejsze osiągnięcia prezentowanych badań można krótko streścić w następujących punktach:

- wykrycie występowania jednego wysokotemperaturowego przejścia fazowego w $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ i w $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$, a także jednego niskotemperaturowego przejścia w $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ i $[\text{Mn}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ oraz wyznaczenie parametrów termodynamicznych tych przemian fazowych,
- wykazanie strukturalnego charakteru przejścia fazowego w $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$, $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ i $[\text{Mn}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$,

- wyznaczenie z pomiarów termogravimetrycznych wartości energii aktywacji dla procesu deaminacji w $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$, $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ i $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_{4,6}](\text{ReO}_4)_2$,
- wyznaczenie wartości energii aktywacji dla reorientacyjnego ruchu ligandów NH_3 dla większości badanych związków z pomiarów temperaturowych zależności widm absorpcyjnych w podczerwieni oraz widm ramanowskiego rozpraszania światła,
- wykazanie, że ruchowi reorientacyjnemu ligandów NH_3 w związkach zawierających aniony zarówno ClO_4^- jak i ReO_4^- towarzyszą niespodziewanie niskie wartości energii aktywacji.

Szczególnie ważnym zrealizowanym celem prezentowanych badań było zastosowanie metod niespójnego, nieelastycznego rozpraszania neutronów w badaniach dynamiki ligandów NH_3 . Mianowicie, analiza widm kwazielastycznie rozproszonych neutronów w funkcji temperatury pozwoliła pokazać, że:

- dynamika reorientacyjna tych ligandów nie ulega istotnemu zaburzeniu w okolicach przejść fazowych w takich związkach jak $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$, $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$ i $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_{4,6}](\text{ReO}_4)_2$,
- ruch ten może być dobrze opisany przy założeniu modelu przeskoków o duże kąty (120°) wokół osi trójrotnej NH_3 .

Porównując temperatury przejść fazowych w związkach z obu anionami (ReO_4^- i ClO_4^-) stwierdzić można, że zamiana anionu na renian(VII) powoduje w większości przypadków przesunięcie przemiany fazowej znacznie powyżej temperatury pokojowej. Natomiast spowolnienie ruchu obu anionów zachodzi w podobnej temperaturze tj. w okolicy 150 K.

Znaczne zmiany entalpii towarzyszące wykrytym przejściom fazowym powodują, że omawiane związki mogą być wykorzystane jako potencjalne akumulatory ciepła (Phase Changing Materials). Uwaga ta dotyczy zwłaszcza kompleksów kadmu i cynku w których jako anion występuje ReO_4^- . Właśnie w tych związkach przejścia fazowe obserwuje się powyżej temperatury pokojowej co stanowi przesłankę do pracy takich układów w realnych warunkach.

7.3.6. *Perspektywy dalszych badań*

Niewątpliwie przedstawione w tym autoreferacie wyniki badań nie udzielają odpowiedzi na wszystkie pytania i nie zamykają dróg do dalszych badań. nierozwiązana pozostaje zwłaszcza sprawa niskotemperaturowych struktur krystalicznych dla związków, w których przemiany prowadzą właśnie do takich transformacji. Nie udało się tego dokonać

wykorzystując pomiary na próbkach proszkowych. Jednym z powodów takiego stanu rzeczy może być właśnie występowanie w tych związkach orientacyjnego dynamicznego nieuporządkowania. Nie można bowiem wykluczyć takiej sytuacji, że w miarę obniżania temperatury, ten nieporządek ulega zamrożeniu. Powoduje to, że rejestrowany obraz dyfrakcyjny jest w rzeczywistości sumą wkładów pochodzących od kilku struktur. Kolejnym celem może być także śledzenie zmian strukturalnych poniżej 100 K a więc poniżej możliwości aparaturowych większości przyrządów do dyfrakcji promieni X. Jest to tym bardziej istotne, że pomiary IR (wykonywane nawet do 9 K) często wskazują na możliwość występowania dalszych przejść fazowych właśnie w tym rejonie.

Kolejnym etapem badań powinno być zastosowanie metody magnetycznego rezonansu jądrowego dla ciała stałego (drugi moment linii, czasy relaksacji) zwłaszcza dla dwóch omawianych kompleksów posiadających przemiany fazowe powyżej temperatury pokojowej. Wreszcie prezentowane tutaj wyniki otwierają szeroki wachlarz możliwości badawczych dla kolejnych grup związków w jakiś sposób będących pochodnymi tutaj omawianych. Mam tu na myśli przede wszystkim ligandy takie jak metyloaminy czy tetrametylourea. Takie porównanie własności strukturalnych, termicznych i dynamicznych, wpływu liganda na zmiany dynamiki byłoby w mojej ocenie niezmiernie interesujące.

7.3.7. *Literatura*

- [1] H. Hillebrecht, G. Thiele, A. Koppenhoefer, H. Vahrenkamp, *Kristallstruktur und Schwingungsspektren von $[Zn(NH_3)_4](ClO_4)_2$* Z.Naturforsch. 49B (1994) 1163-1168.
- [2] A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, Ł. Hetmańczyk, E. Ściesińska, J. Ściesiński, S. Wróbel, N. Górka, *Polymorphism of $[Zn(NH_3)_4](ClO_4)_2$ and $[Zn(NH_3)_4](BF_4)_2$ Studied by Differential Scanning Calorimetry and Far Infrared Spectroscopy*, J. Mol. Struct. 596 (2001) 123-128.
- [3] I. Natkaniec, D. Chudoba, Ł. Hetmańczyk, V.Yu. Kazimirov, J. Krawczyk, I.L. Sashin, S. Zalewski, Parameters of the NERA spectrometer for cold and thermal moderators of the IBR-2 pulsed reactor, J. Phys. Conference Series 554 (2014) 012002 1088/1742- 6596/554/1/012002.
- [4] J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, Ł. Hetmańczyk, *Phase transition and molecular motions in $[Ca(NH_3)_6](ClO_4)_2$* Ann. Pol. Chem. Soc. (2007) 358–361, ISBN: 978-83-922424r-r7-5.

- [5] A. Migdał-Mikuli, J. Hetmańczyk, *Thermal behavior of $[Ca(H_2O)_4](ClO_4)_2$ and $[Ca(NH_3)_6](ClO_4)_2$* J. Therm. Anal. Calorim. 91 (2) (2008) 529–534.
- [6] N. Gorska, A. Inaba, Y. Hirao, E. Mikuli, K. Hołderna-Natkaniec, *Structure, molecular motion, and phase transition of a highly disordered crystal $[Co(NH_3)_6](ClO_4)_3$* , RSC Adv. 2 (2012) 4283-4291.
- [7] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, J.A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K.N. Kudin, J.C. Burant, J.M. Millam, S.S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J.E. Knox, H.P. Hratchian, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, P.Y. Ayala, K. Morokuma, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, V.G. Zakrzewski, S. Dapprich, A.D. Daniels, M.C. Strain, O. Farkas, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A.G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, C. Gonzalez, and J.A. Pople, Gaussian 03, Revision D.01, Gaussian Inc, Wallingford CT, 2004.
- [8] A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, S. Wróbel, Ł. Hetmańczyk, *DSC Investigations of the Phase Transitions of $[M(NH_3)_6](BF_4)_2$, where $M = Co$ and Cd* , Z. Naturforsch. A: Phys. Sci. 54 (1999) 590–594.
- [9] R.W.G. Wyckoff, The structure of crystals. Supplement for 1930-1934 to the Second Edition REINHOLD PUBLISHING CORPORATION, New York 1935 USA
- [10] M. Rachwalska, J.M. Janik, J.A. Janik, G. Pytasz, T. Waluga, *Specific heat of solid $[Ni(NH_3)_6](ClO_4)_2$ in the temperature range from 115 to 300 K*, Phys Stat Sol (a). 30 1975 K81–2.
- [11] H.E. Kissinger, *Variation of peak temperature with heating rate in differential thermal analysis*. J Res Natl Bur Stand. 57 (1956) 217–221.
- [12] H.E. Kissinger, *Reaction kinetics in differential thermal analysis*, Anal Chem. 29 (1957) 1702–1706.
- [13] T. Akahira, T. Sunose, *Method of determining activation deterioration constant of electrical insulating materials*, Res Report Chiba Inst Technol (SciTechnol) 16 (1971) 22–31.

- [14] K.S. Pitzer, *The crystal structure of tetraamminecadmium perrhenate, [Cd(NH₃)₄](ReO₄)₂*, Z. Krist. 92 (1935) 131–135.

7.4. Dane bibliometryczne publikacji wybranych do postępowania habilitacyjnego:

1. Sumaryczny IF wybranych publikacji: **20.7**
2. Sumaryczna liczba punktów wg klasyfikacji MNiSW: **270**

8. Szczegółowy wykaz całkowitego dorobku naukowego

8.1. Dane bibliometryczne³

1. Całkowita liczba publikacji: **46** (37 z IF + 3 bez IF + 6 rodz. w książkach)
2. Sumaryczny IF **37** publikacji (wg roku wydania): **65.062**
3. Liczba cytowań: **152/167⁵**
4. Liczba cytowań bez autocytowań: **71/53⁶**
5. Indeks Hirscha: **7⁷/7**
6. Udział w konferencjach naukowych: **52**

8.2. Wykaz pozostałych prac naukowych opublikowanych poza cyklem wymienionym w pkt. 7.2

8.2.1. Publikacje ujęte w bazie Journal Citation Reports (JCR) oraz w wykazie A listy MNiSW

Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

1. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, S. Wróbel, **Ł. Hetmańczyk**, *DSC Investigations of the Phase Transitions of [M(NH₃)₆](BF₄)₂, where M = Co and Cd*, Z. Naturforsch. A: Phys. Sci, 54 (1999) 590-594.

IF² = 0.789; cyt. 23/22³

Udział własny 20 %; synteza próbek, opracowanie danych DSC, wykonanie wszystkich rysunków, współuczestnictwo w redakcji tekst publikacji.

⁵ Z uwzględnieniem cytowań pracy 30 z rozdziału 7.2.2

⁶ Z wyłączeniem autocytowań wszystkich współautorów publikacji

⁷ Indeks H z uwzględnieniem pracy 10 z rozdziału 7.2.1.

2. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, E. Ściesińska, J. Ściesiński, S. Wróbel, N. Górska, *Polymorphism of $[Zn(NH_3)_4](ClO_4)_2$ and $[Zn(NH_3)_4](BF_4)_2$ Studied by Differential Scanning Calorimetry and Far Infrared Spectroscopy*, J. Mol. Struct. 596 (2001) 123-128.

IF = 0.907; cyt. 7/9

Udział własny 15%; synteza próbki, opracowanie danych DSC, przygotowanie rysunków i tabel, udział w redakcji tekstu publikacji.

3. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, K. Hołderna-Natkaniec, W. Łasocha, *Phase transitions, Structural changes and Molecular Motions in $[Zn(NH_3)_4](BF_4)_2$ Studied by Neutron Scattering, X-Ray Powder Diffraction and Nuclear Magnetic Resonance*, J. Solid State. Chem. 174 (2003) 357-364.

IF = 1.413; cyt. 10/11

Udział własny 15%; synteza próbki, opracowanie pomiarów rozpraszania neutronów, wyznaczenie temperaturowej zależności parametrów sieciowych, współudział w rozwiązywaniu struktury z danych dyfrakcji promieni X na próbce proszkowej, przygotowanie 3 rysunków, udział w przygotowaniu tekstu publikacji.

4. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, M. Barańska, **Ł. Hetmańczyk**, *Vibrational spectrum and molecular structure of $[Cu(NH_3)_5](ClO_4)_2$* , Chem. Phys. Lett. 381 (2003) 329-334.

IF = 2.438; cyt. 9/9

Udział własny 10%; przygotowanie próbki, analiza eksperymentalnych widm oscylacyjnych, przygotowanie części rysunków.

Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

5. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, R. Dziembaj, D. Majda, **Ł. Hetmańczyk**, *Thermal decomposition of $[Mg(NH_3)_6](NO_3)_2$, $[Ni(NH_3)_6](NO_3)_2$ and $[Ni(ND_3)_6](NO_3)_2$* , Thermochem. Acta 419 (2004) 223-229.

IF = 1.161; cyt. 17/18

Udział własny 10 %; współudział w przygotowaniu części rysunków i tabel, uczestnictwo w redakcji tekstu publikacji.

6. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, E. Ściesińska, J. Ściesiński, S. Wróbel, *Phase transition, molecular motions, structural changes and low-frequency vibrations in $[Cu(NH_3)_5](ClO_4)_2$* , Chem. Phys. 317 (2005) 188–197.

IF = 1.934; cyt. 3/4

Udział własny 20%; przygotowanie próbki, opracowanie danych DSC i widm FT-FIR w tym temperaturowej zależności szerokości pasma, opracowanie wyników rozpraszania neutronów, przygotowanie wszystkich rysunków, udział w redakcji tekstu publikacji.

7. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, E. Ściesińska, J. Ściesiński, *Phase transition and its connection with molecular motions in $[Cu(NH_3)_5](BF_4)_2$* , J. Mol. Struct. 792-793C (2006) 157-162.

IF = 1.495; cyt. 2/2

Udział własny 30%; synteza próbki, analiza danych DSC, opracowanie widm FT-FIR i FT-MIR i ich temperaturowych zależności, przygotowanie wszystkich rysunków, udział w dyskusji wyników i przygotowaniu finalnej wersji manuskryptu.

8. E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, W. Medycki, A. Kowalska, *Phase transitions and molecular motions in $[Zn(NH_3)_4](BF_4)_2$ studied by nuclear magnetic resonance, infrared and Raman spectroscopy*, J. Phys. Chem. Solids 68 (2007) 96-103.

IF = 0.899; cyt. 5/7

Udział własny 30%; analiza widm FT-MIR i FT-RS, przygotowanie 5 rysunków, 2 tabel, udział w dyskusji wyników i przygotowaniu tekstu publikacji.

9. A. Migdał-Mikuli, J. Hetmańczyk, W. Nitek, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, *Phase transitions in $[Ca(H_2O)_4](NO_3)_2$ studied by differential scanning calorimetry, X-ray single crystal diffraction and neutron powder diffraction. Part I*, J. Alloys Compd. 432 (2007) 232-240.

IF = 1.455; cyt. 2/2

Udział własny 10%; opracowanie wyników dyfrakcji neutronów, napisanie części tekstu dot. rozpraszania neutronów, udział w dyskusji pozostałych wyników.

10. A. Migdał-Mikuli, J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, *Thermal behaviour of $[Ca(H_2O)_4](NO_3)_2$* , J. Therm. Anal. Calorim. 89 (2007) 499-503.⁸

IF = 1.483; cyt. 7/7

Udział własny 10%, udział w dyskusji wyników, współudział w przygotowaniu tekstu publikacji

11. N. Górską, **Ł. Hetmańczyk**, W. Łasocha, E. Mikuli, *Low Temperature Crystal Structure of $[Cr(NH_3)_6](BF_4)_3$* , J. Alloys Compd. 442 (2007) 80-82.

IF = 1.455; cyt. 1/1

Udział własny 30%; współudział w rozwiązaniu struktury i uściślenia jej metodą Rietvelde, przygotowanie rysunku, udział w dyskusji wyników i przygotowaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

12. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, W. Nitek, *Phase transitions in $[Ca(H_2O)_4](ClO_4)_2$ studied by differential scanning calorimetry, X-ray single crystal diffraction and neutron powder diffraction*, J. Mol. Struct. 891 (2008) 233-241.

IF = 1.594; cyt. 4/4

Udział własny 15%; opracowanie danych z dyfrakcji neutronów, korespondencja z edytorem i recenzentami, współuczestnictwo w przygotowaniu tekstu publikacji.

13. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, K. Hołderna-Natkaniec, I. Natkaniec, *Phase transitions and H_2O motions in $[Ca(H_2O)_4](NO_3)_2$ studied by infrared*

⁸ Publikacja nie ujęta w bazie Web of Science z powodu niepełnego imienia w spisie autorów

spectroscopy, inelastic/quasi-elastic incoherent neutron scattering and proton magnetic resonance, Part II, J. Alloy Compd. 469 (2009) 73-81.

IF = 2.135; cyt. 3/3

Udział własny 15%; autor korespondujący z edytorem i recenzentami, opracowanie danych rozpraszania neutronów (QENS, INS), przygotowanie 3 rysunków, przygotowanie części tekstu dot. wyników uzyskanych z metod rozpraszania neutronów, udział w dyskusji rezultatów i przygotowaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

14. A. Migdał-Mikuli, J. Hetmańczyk, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, *Thermal behaviour of polycrystalline $[Ba(H_2O)_3](ClO_4)_2$ and $[Ba(NH_3)_4](ClO_4)_2$* , Thermochim. Acta 487 (2009) 43–48.

IF = 1.742; cyt. 5/7

Udział własny 10%; udział w dyskusji wyników i przygotowaniu manuskryptu.

15. J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, K. Hołderna-Natkaniec, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, *Phase transitions and H_2O motions in $[Ca(H_2O)_4](ClO_4)_2$ studied by infrared spectroscopy, inelastic/quasielastic incoherent neutron scattering and proton magnetic resonance. Part II*, J. Mol. Struct. 923 (2009) 103–109.

IF = 1.551; cyt. 4/4

Udział własny 15 %; autor korespondujący z edytorem i recenzentami, przygotowanie części tekstu dot. rozpraszania neutronów i opracowanie ich wyników (QENS, INS).

16. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, K. Drużbicki, A. Wesełucha-Birczyńska, L.M. Proniewicz, *Vibrations and reorientations of H_2O molecules and NO_3^- anions in $[Ca(H_2O)_4](NO_3)_2$ studied by incoherent inelastic and quasielastic neutron scattering, Raman light scattering and infrared absorption spectroscopy*, J. Chem. Phys. 131 (2009) 094506–094509.

IF = 3.093; cyt. 6/3

Udział własny 15%; autor korespondujący z edytorem i recenzentami, współudział w przygotowaniu finalnej wersji tekstu publikacji, udział w dyskusji wyników.

17. R. Bujakiewicz-Korońska, **Ł. Hetmańczyk**, B. Garbarz-Głos, A. Budziak, J. Koroński, J. Hetmańczyk, M. Antonova, A. Kalvane & D. Nałęcz, *Investigations of Low Temperature Phase Transitions in $BiFeO_3$ Ceramic by Infrared Spectroscopy*, Ferroelectrics 417(1) (2011) 63-69.

IF = 0.391; cyt. 2/2

Udział własny 15%; wykonanie i opracowanie temperaturowych widm FT-MIR, sporządzenie wszystkich rysunków, współudział w napisaniu części tekstu publikacji.

18. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, A. Wesełucha-Birczyńska, *Raman light scattering, infrared absorption and differential scanning calorimetry studies of the phase transition and vibrational & reorientational dynamics of H_2O ligands and ClO_4^- anions in $[Ba(H_2O)_3](ClO_4)_2$* , J. Raman Spectrosc. 43 (2012) 1118-1125.

IF = 2.679; cyt. 4/4

Udział własny 25%; autor korespondujący z edytorem i recenzentami, udział w dyskusji wyników i edycji manuskryptu.

19. R. Bujakiewicz-Korońska, **Ł. Hetmańczyk**, B. Garbarz-Głos, A. Budziak, A. Kalvane, K. Bormanis, K. Družbicki, *Low temperature measurements by infrared spectroscopy in CoFe₂O₄ ceramic*, Cent. Eur. J. Phys. 10(5) (2012) 1137-1143.

IF = 0.905; cyt. 1/1

Udział własny 10%; pomiar i opracowanie temperaturowych widm FT-MIR, FT-FIR, przygotowanie tekstu dotyczącego tych pomiarów.

20. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, *Vibrational and reorientational motions of H₂O ligands, phase transition and thermal properties of [Sr(H₂O)₆]Cl₂*, Spectrochim. Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 115 (2013) 504–510.

IF = 2.129; cyt. 2/2

Udział własny 20%; współudział w pomiarach IR, udział w dyskusji wyników i przygotowaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

21. **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, E. Mikuli, A. Migdał-Mikuli, W. Nitek, K. Hołderna-Natkaniec, I. Natkaniec, *Crystal structure of two [Ba(H₂O)₃](ClO₄)₂ phases and H₂O ligands reorientational motions studied by X-ray single crystal, inelastic and quasielastic incoherent neutron scattering and proton magnetic resonance*, J. Phys. Chem. Solids 74 (2013) 1775-1782.

IF = 1.594; cyt. 0/0

Udział własny 20%; wykonanie i opracowanie pomiarów rozpraszania neutronów, napisanie tekstu publikacji dotyczącej tej części.

22. M. Rachwalska, I. Natkaniec, K. Zborowski, **Ł. Hetmańczyk**, Z. Urbanek, *Inelastic Neutron Scattering (INS) Study of Low Frequency Vibrations and Hydrogen Bonding of (E)-Benzil Monoxime*, Z. Phys. Chem. 228(1) (2014) 63–97.

IF = 1.356; cyt. 0/0

Udział własny 10%; wykonanie i opracowanie pomiarów IR, wykonanie obliczeń widm IR metodą DFT w periodycznych warunkach brzegowych w programie CASTEP, analiza oddziaływań w kryształach metodą Hirshfelda.

23. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, M. Florek-Wojciechowska, H. Harańczyk, *Vibrations and reorientations of H₂O molecules in [Sr(H₂O)₆]Cl₂ studied by Raman light scattering, incoherent inelastic neutron scattering and proton magnetic resonance*, Spectrochim. Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 124 (2014) 429–440.

IF = 2.353; cyt. 2/2

Udział własny 10%; wykonanie i opracowanie pomiarów dyfrakcji neutronów na próbce polikrystalicznej, udział w dyskusji wyników i powstawaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

24. A. Pawlukojć, **Ł. Hetmańczyk**, *IR, INS and DFT investigations on dynamical properties of low temperature phase of choline chloride*, Chem. Phys. 445 (2014) 31–37.

IF = 1.652; cyt. 2/2

Udział własny 30%; pomiar i analiza temperaturowych widm w zakresie podczerwieni, napisanie części manuskryptu dotyczącego tych pomiarów.

25. A. Pawlukojć, **Ł. Hetmańczyk**, *INS, DFT and temperature dependent IR studies on dynamical properties of acetylcholine chloride*, Vib. Spectrosc. 82 (2016) 37–43.⁹

IF = 1.682; cyt. 0/-

Udział własny 30%; pomiar i analiza temperaturowych widm w zakresie podczerwieni, napisanie części manuskryptu dotyczącego tych pomiarów.

26. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, Edward Mikuli, *Vibrational and reorientational dynamics, crystal structure and solid–solid phase transition studies in $[Ca(H_2O)_6]Cl_2$ supported by theoretical (DFT) calculations*, J. Raman Spectrosc. 47 (2016) 591–601. DOI 10.1002/jrs.4863.

IF = 2.395; cyt. 0/0

Udział własny 20%; pomiar i współudział w opracowaniu danych uzyskanych z rozpraszania neutronów, udział w teoretycznym modelowaniu widm oscylacyjnych, udział w dyskusji wyników i przygotowaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

27. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, *Raman light scattering, infrared absorption and neutron scattering studies of the phase transition and reorientational dynamics of H_2O ligands and ClO_4^- anions in $[Ca(H_2O)_4](ClO_4)_2$* , Vib. Spectrosc. 83 (2016) 26–35.

IF = 1.682; cyt. 0/1

Udział własny 30%; pomiar i współudział w opracowaniu danych uzyskanych z rozpraszania neutronów, udział w teoretycznym modelowaniu widm oscylacyjnych, udział w dyskusji wyników i przygotowaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

8.2.2. Publikacje nie ujęte w bazie Journal Citation Reports (JCR)

28. **Ł. Hetmańczyk**, E. Mikuli, I. Natkaniec, *Phase transition in $[Cu(NH_3)_5](BF_4)_2$ studied with neutron scattering methods*, Annals Polish Chem. Soc. (2007) ISBN 978-83-922424-7-5, str. 142–145.

Udział własny 50%; synteza próbki do badań, współudział w wykonaniu pomiarów neutronowych, opracowanie pomiarów neutronowych, napisanie manuskryptu, przygotowanie wszystkich rysunków, przygotowanie odpowiedzi na uwagi recenzentów.

29. J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, *Phase transition and molecular motions in $[Ca(NH_3)_6](ClO_4)_2$* , Annals Polish Chem. Soc. (2007) ISBN 978-83-922424-7-5, str. 358–361.

⁹ Publikacja nie ujęta w bazie SCOPUS

Udział własny 10%; opracowanie pomiarów dyfrakcji promieni X i wyznaczenie parametru stałej sieci, współudział w wykonaniu temperaturowych pomiarów widm absorpcyjnych w zakresie środkowej podczerwieni, współudział w edycji i korekcie tekstu publikacji.

30. I. Natkaniec, D. Chudoba, **Ł. Hetmańczyk**, V.Yu. Kazimirov, J. Krawczyk, I.L. Sashin, S. Zalewski, Parameters of the NERA spectrometer for cold and thermal moderators of the IBR-2 pulsed reactor, *Journal of Physics: Conference Series* 554 (2014) 012002. DOI: 1088/1742-6596/554/1/012002.
cyt. 8/10

Udział własny 10%; przygotowanie jednego rysunku (Fig. 11), współudział w wykonaniu części pomiarów neutronowych, udział w edycji i korekcie tekstu publikacji.

8.2.3. Współautorstwo rozdziałów w książkach

31. E. Mikuli, A. Migdał-Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, K. Hołderna-Natkaniec, „Phase transitions, structural changes and molecular motions in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ ” [w:] *Neutron scattering and complementary methods in investigations of condensed phase*, eds J. Chruściel, A. Vol. 1, University of Podlasie Publishing House Siedlce 2003, Monograph No. 45, pp.43-51, format B-5, 9 stron, PL ISSN 0860-2719.

Udział własny 10%; synteza próbki, współudział w wykonaniu pomiarów neutronowych, opracowanie danych neutronowych, przygotowanie 3 rysunków dot. metod rozpraszania neutronów i pomiarów x-ray (analiza metodą LeBail), udział w napisaniu części manuskryptu.

32. **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, " $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ i $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_2$ - kryształy z dynamicznym nieporządkiem orientacyjnym" w: "NA POGRANICZU CHEMII I BIOLOGII", pod red. H. Koroniaka i J. Barciszewskiego, Wydawnictwo Naukowe UAM, Tom IX, format B5. ISBN 83-232-1361-5, str. 121-127.

Udział własny 50%; synteza obu związków, współudział w wykonaniu pomiarów neutronowych i DSC, wykonanie i opracowanie temperaturowych widm IR, opracowanie danych rozpraszania neutronów, wykonanie 3 rysunków (Rys.1, Rys. 2, Rys. 3) współudział w napisaniu finalnej wersji manuskryptu.

33. E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, "Fourierowska spektroskopia w środkowej podczerwieni" w: *Wybrane metody spektroskopii i spektrofotometrii molekularnej w analizie strukturalnej*, pod. red. K. Małek i L.M. Proniewicza, Wyd. UJ Kraków 2005, format B-5, ISBN 83-233-2014-4. rozdz. 1, str. 11-35.

Udział własny 40%; przygotowanie 3 rysunków (Rys. 1.2, Rys. 1.6, Rys. 1.7) współautorstwo tekstu w tym szczególnie opisu aparatury i poszczególnych ćwiczeń.

34. E. Mikuli, A. Migdał-Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, Phase transitions and molecular motions in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$ studied by infrared spectroscopy, X-ray powder diffraction and neutron scattering methods, [w:] *Neutron scattering and complementary methods in investigations of condensed phase*, eds J. Chruściel, A. Szytuła, W. Zając, Vol.

2, University of Podlasie Publishing House Siedlce 2005, Monograph No. 60, pp.43-53, format B-5, 11 stron, PL ISSN 0860-2719.

Udział własny 20%; synteza próbki, przygotowanie wszystkich rysunków i tabeli, współudział w opracowaniu danych uzyskanych z metod rozpraszania neutronów, wykonanie i opracowanie temperaturowych widm IR, opracowanie danych dyfrakcji promieni X na próbce proszkowej, współudział w napisaniu finalnej wersji tekstu publikacji.

35. W. Łasocha, **Ł. Hetmańczyk**, M. Grzywa, "Dyfrakcja promieni X", [w:] Komplementarne metody badań przemian fazowych pod. red. naukową E. Mikuli i A. Migdał-Mikuli, Wyd. UJ, Kraków 2006, format B-5, ISBN 83-233-2091-8, rozdz. 3, str. 71-90.

Udział własny 25%; przygotowanie 2 rysunków (Rys. 3.1 i Rys. 3.3), opis przykładów i oprogramowania.

36. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, "Komplementarne badania przemian fazowych, zmian struktury krystalicznej i dynamiki molekularnej w $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{NO}_3)_2$ ", [w:] Metody komplementarne w badaniach faz skondensowanych pod red. J. Chruściel, A. Szytuła, W. Zając, Wydawnictwo Akademii Podlaskiej, Siedlce 2008, Monografie nr 101, PL ISSN 0860-2719, str. 147-172.

Udział własny 15%; współudział w wykonaniu i opracowaniu pomiarów neutronowych (ND, INS, QENS), współudział w napisaniu części tekstu publikacji dot. metod rozpraszania neutronów.

9. Udział w konferencjach naukowych (postery i wystąpienia ustne)

1. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, S. Wróbel, **Ł. Hetmańczyk**, „Przejścia fazowe w $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ i $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{BF}_4)_2$ ”, S2, P45, 40, XLII Zjazd Naukowy PTChem i SiTPChem, Rzeszów, 6.09-10.09.1999, poster.
2. N. Górka, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, S. Wróbel, „Przejścia fazowe w $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$ i $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ ”, S4 P46, 131, XLIII Zjazd Naukowy PTChem i SiTPChem, Łódź, 10.09-15.09.2000, poster.
3. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, E. Ściesińska, J. Ściesiński, S. Wróbel, „Phase Transition in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$, $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ studies by Differential Scanning Calorimetry and Far Infrared Spectroscopy”, P-38, 92, III Międzynarodowa Konferencja Naukowa – Vibrational Spectroscopy in Materials Science, Kraków, 23.09-26.09.2000, poster.
4. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec W. Łasocha, M. Michalec, „Phase Transitions, Structural Changes and Molecular Motions in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ Studied by Neutron Scattering Methods and X-Ray Diffraction.”, O.M2.P6, 328, 20th European Crystallographic Meeting ECM20 Crystallography in Natural Sciences and Technology, Kraków, 25.09-31.09.2001, poster.
5. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, E. Ściesińska, J. Ściesiński, S. Wróbel, „Polymorphism of $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_2$ studies by Differential Scanning Calorimetry and

- Far Infrared Spectroscopy”, P33, VIth International Conference on Molecular Spectroscopy, Wrocław – Łądek Zdrój, 29.09.2001 – 3.10.2001, poster.
6. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, I. Natkaniec, **Ł. Hetmańczyk**, „Badanie przejść fazowych w $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ metodami rozpraszania neutronów oraz metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej, dyfrakcji promieni X i spektroskopii w dalekiej podczerwieni”, Ogólnopolska Konferencja Rozpraszania Neutronów, Chlewiska k. Siedlec, 30.09 – 3.10.2001, współautor wystąpienia ustnego.
 7. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, W. Łasocha, „Wyznaczenie struktury krystalicznej dla $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ w temperaturze 295 K”, S02, 293, XLV Zjazd Naukowy PTCh i SiTPChem, Kraków, 9.09-13.09.2002, poster.
 8. E. Mikuli, A. Migdał-Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, K. Hołderna-Natkaniec, „Phase transitions, structural changes and molecular motions in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ ”, materiały zjazdowe, Ogólnopolskie Seminarium „Rozpraszanie neutronów i metody komplementarne w badaniach fazy skondensowanej”, Chlewiska k. Siedlec, 1.06 – 4.06.2003, współautor wystąpienia ustnego.
 9. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, „Phase transition, reorientational motions and molecular structure of $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_2$ ”, P-68, VIIth International Conference on Molecular Spectroscopy, Wrocław – Łądek Zdrój, 11.09 – 14.09.2003, poster.
 10. **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, „ $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ i $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_2$ - kryształy z dynamicznym nieporządkiem orientacyjnym”, "Na pograniczu chemii i biologii", Wydawnictwo Naukowe UAM, Tom IX, Materiały I Ogólnopolskiej Konferencji Doktorantów Wydziałów Chemicznych str. 121-127, Republika Czeska, Velke Losiny 3.04-5.04.2003, komunikat.
 11. N. Górską, **Ł. Hetmańczyk**, E. Mikuli, A. Migdał-Mikuli, K. Hołderna-Natkaniec, W. Kasperkowiak "Phase transitions and reorientational motions of the complex cations and NH_3 ligands in polycrystallines $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_3$ and $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ ", Raport Nr 1930/AP, 106-109, XXXVI Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków, 1.12-2.12.2003, poster.
 12. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec "Phase transition, molecular motions and structural changes in $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_2$ ", 11th International Seminar on Neutron Scattering Investigation in Condensed Matter, Poznań, 6.05 – 8.05.2004, współautor wystąpienia ustnego.
 13. **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, I. Natkaniec "Low frequency vibrations in $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{ClO}_4)_2$ " Abstract of Workshop on Neutrons and Numerical Methods 2, P13, Insitut Laue-Langevin, Grenoble, Francja, 14.09 – 18.09.2004, poster.
 14. **Ł. Hetmańczyk**, W. Medycki, E. Mikuli, A. Migdał-Mikuli, "Reorientational motions of the NH_3 ligands in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{BF}_4)_2$ ", Raport Nr 1951/AP, 40-41, XXXVII Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków, 1.12-2.12.2004, poster.
 15. **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, I. Natkaniec, „Phase transitions in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$ studied by X-ray powder diffraction and neutron scattering methods”,

Materiały Zjazdowe Ogólnopolskiej Konferencji pt.: "Rozpraszanie neutronów i metody komplementarne w badaniach fazy skondensowanej", Chlewiska k/Siedlec, 5.06 - 9.06.2005, współautor wystąpienia ustnego.

16. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, E. Ściesińska, J. Ściesiński "Phase transition and its connection with molecular motions in $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{BF}_4)_2$ " Abstracts of VIIIth International Conference on Molecular Spectroscopy, P51, Wrocław-Lądek Zdrój 13.09-18.09.2005, poster.
17. **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, K. Hołderna-Natkaniec, I. Natkaniec, „Phase transitions and molecular motions in $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4](\text{ClO}_4)_2$ studied by quasielastic neutron scattering and nuclear magnetic resonance methods”, Raport No. 1969/AP str. 27-28, XXXVIII Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications. Kraków, 1.12-2.12.2005, poster.
18. E. Mikuli, N. Górka, **Ł. Hetmańczyk**, W. Łasocho, "Structural Changes in $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6](\text{BF}_4)_2$ studied by X-ray powder diffraction", 15th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements, CRS038PO, 42, Kraków, 15.07-20.07.2006, poster.
19. J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, **Ł. Hetmańczyk**, Badanie przemiany fazowej w $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ ”, S3, P17, 94, XLIX Zjazd Naukowy PTChem i SiTPChem, Gdańsk, 18.09-22.09.2006, poster.
20. **Ł. Hetmańczyk**, E. Mikuli, N. Natkaniec, „Badanie przemiany fazowej w $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5](\text{BF}_4)_2$ metodami rozpraszania neutronów”, S3, P18, 94, XLIX Zjazd Naukowy PTChem i SiTPChem, Gdańsk, 18.09-22.09.2006, poster.
21. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec "Phase transitions, molecular motion and structural changes in $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{NO}_3)_2$ studied by neutron scattering and complementary methods", V Ogólnopolska Konferencja "Rozpraszanie neutronów i metody komplementarne w badaniach fazy skondensowanej", Chlewiska k/Siedlec. 3.06-6.06.2007, współautor wystąpienia ustnego.
22. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, K. Hołderna-Natkaniec, I. Natkaniec, „Phase transitions and molecular motions in $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{ClO}_4)_2$ studied by quasielastic neutron scattering and nuclear magnetic resonance methods”, XL Ogólnopolskie Seminarium na Temat Magnetycznego Rezonansu Jądrowego i Jego Zastosowań, Report No. 2002/AP, P17, 27-28, 3.12-4.12.2007 Kraków, poster.
23. **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, "Phase transition and H_2O motions in $[\text{Ba}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{ClO}_4)_2$ studied by differential scanning calorimetry, infrared spectroscopy and inelastic/quasielastic incoherent neutron scattering", XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS 2008, P1-29 64. Opatija, Croatia, 31.08-5.09. 2008, poster.
24. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, "Phase transition and NH_3 motions in polycrystalline $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ studied by infrared spectroscopy and inelastic/quasielastic incoherent neutron scattering", XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS 2008, P8-4, 287, Opatija, Croatia, 31.08-5.09.2008, poster.

25. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, „Komplementarne badania przejść fazowych i reorientacji ligandów w $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{ClO}_4)_2$ i $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ ”, VI Ogólnopolska Konferencja "Rozpraszanie neutronów i metody komplementarne w badaniach faz skondensowanych", Chlewiska k. Siedlec 14.06 – 18.06.2009, referat.
26. R. Bujakiewicz-Korońska, **Ł. Hetmańczyk**, B. Garbarz-Glos, A. Budziak, J. Koroński, J. Hetmańczyk, M. Antonova, A. Kalvane, Investigations of Low Temperature Phase Transitions in BiFeO_3 Ceramic by Infrared Spectroscopy, I Lithuanian-Ukrainian-Polish Meeting on Ferroelectrics Physics, LUP I, P-24, 58, Vilnius, Lithuania, 12.09-16.09.2010, poster.
27. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, K. Hołderna-Natkaniec, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, “Phase Transition and Molecular Motions in $[\text{Ba}(\text{H}_2\text{O})_3](\text{ClO}_4)_2$ Studied by Nuclear Magnetic Resonance and Complementary Methods”, XLIII Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Report No. 2046/AP, No 13, 15-16, 1.12-2.12.2010, Kraków, poster.
28. R. Bujakiewicz-Korońska, **Ł. Hetmańczyk**, B. Garbarz-Glos, A. Budziak, A. Kalvane, M. Bormanis, “Low Temperature Measurements by Infrared Spectroscopy in CoFe_2O_4 Ceramics”, International Conference Functional Materials and Nanotechnologies "FMNT-2011", PO-49, 139, Riga Latvia, 5.04-8.04.2011, poster.
29. N. Górska, **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, I. Natkaniec, "Phase transition in $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_3$ studied by neutron scattering methods", 5th European Conference on Neutron Scattering, ECNS 2011, M89 D-326, 58, Prague, Czech Republic, 17.07-22.07.2011, poster.
30. I. Natkaniec, D. Chudoba, **Ł. Hetmańczyk**, V.Yu. Kazimirov, J. Krawczyk, I.L. Sashin, S. Zalewski, „Parametry spektrometru NERA dla termicznego i zimnego moderatora na impulsowym reaktorze IBR-2M”, VIII Ogólnopolska Konferencja "Rozpraszanie neutronów i metody komplementarne w badaniach faz skondensowanych", Chlewiska k/Siedlec, 16.06-20.06.2013, współautor wystąpienia ustnego.
31. I. Natkaniec, D. Chudoba, **Ł. Hetmanczyk**, V.Yu. Kazimirov, J. Krawczyk, I.L. Sashin, S. Zalewski, “Parameters of the NERA spectrometer for cold and thermal moderators of the IBR-2M pulsed reactor”, Dynamics of Molecules and Materials II Satellite workshop of the International Conference on Neutron Scattering, University of Glasgow, Scotland, 5.07-6.07.2013, poster.
32. I. Natkaniec, D. Chudoba, **Ł. Hetmanczyk**, V.Yu. Kazimirov, J. Krawczyk, I.L. Sashin, S. Zalewski, “Parameters of the NERA spectrometer for cold and thermal moderators of the IBR-2M pulsed reactor”, International Conference on Neutron Scattering ICNS2013, P.058, 171, Edinburgh, UK, 8.07–12.07.2013, poster.
33. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, “Phase transition, thermal properties and reorientational motions of NH_3 ligands in polycrystalline $[\text{Mn}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ ”, The 2nd Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, PS3.58, 408, Vilnius, Lithuania, 27.08-30.08.2013, poster.

34. **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, “Thermal properties of $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ and $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6](\text{ReO}_4)_2$ ”, XIV International Conference on Thermal Analysis and Calorimetry in Russia (RTAC - 2013), 12, 98-100, St. Petersburg, Rosja, 23.09-29.09.2013, poster.
35. **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, I. Natkaniec, “*Structural phase transition in $[\text{Cd}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ studied with neutron scattering methods and infrared spectroscopy*”, International Conference QENS/WINS 2014, P-14, Autrans, France, 11.05-16.05.2014, poster.
36. A. Filarowski, D. Chudoba, **Ł. Hetmanczyk**, A. Kwocz, P. Szklarz, “Spectroscopic and crystallographic investigations of nitro derivatives of ortho-hydroxyacetophenones” International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2, 39, Dubna, Moscow region, Russia , 24.06-27.06.2014 współautor wystąpienia ustnego.
37. I. Sashin, D. Chudoba, L. Hetmanczyk, I. Natkaniec, S. Zalewski, “Spectrometer NERA: results of modernization and proposals for further development”, International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2, 39, Dubna, Moscow region, Russia , 24.06-27.06.2014, poster.
38. **Ł. Hetmanczyk**, J. Hetmanczyk, E. Mikuli, “Low temperature phase transition in $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4](\text{ReO}_4)_2$ studied by infrared spectroscopy and neutron scattering”, International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2, 47, Dubna, Moscow region, Russia, 24.06-27.06.2014, poster.
39. J. Hetmanczyk, **Ł. Hetmanczyk**, A. Migdał-Mikuli, “Comparison of dynamical properties of $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{ClO}_4)_2$ and $[\text{Ca}(\text{NH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ compounds studied by vibrational spectroscopies (IR and IINS)”, International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2, 49, Dubna, Moscow region, Russia, 24.06-27.06.2014, poster.
40. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, A. Migdał-Mikuli, “Low temperature phase transition in $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_2$ studied by infrared and Raman spectroscopy and neutron scattering”, The 32nd European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2014), Po1.30, 198, The Heinrich-Heine-University, Düsseldorf, Germany, 24.08-29.08.2014, poster.
41. D. Chudoba, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, I. L. Sashin, “Parameters of the NERA spectrometer at the IBR-2 pulse reactor”, РНСИ-КС-2014, Совещание по использованию рассеяния нейтронов и синхротронного излучения в конденсированных средах, , St. Petersburg, Old Petergof, 27.10-31.10.2014, współautor wystąpienia ustnego.
42. New approaches in materials design, Mendeleev University of Chemical Technology, Moscow, 11.12-12.12.2014, uczestnictwo bez wystąpienia.
43. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, “Vibrations and reorientations of H_2O molecules and ReO_4^- anions and phase transition in $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_2](\text{ReO}_4)_2$ ”, 8th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy ICAVS-8, A109 Material Science 1, 220-221, VIENNA, Austria, 12.07-17.07.2015, poster.
44. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, Anna Migdał-Mikuli, “Raman light scattering, infrared absorption and neutron scattering studies of the phase transition and reorientational

- dynamics of H₂O ligands and ClO₄⁻ anions in [Ca(H₂O)₄](ClO₄)₂”, 8th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy ICAVS-8, C052 Material Science 2, 586-587, VIENNA, Austria, 12.07-17.07.2015, poster.
45. D. Chudoba, **Ł. Hetmańczyk**, I. Natkaniec, I.L. Sashin, “Parameters of the NERA spectrometer on the pulse reactor IBR-2”, VI European Conference on Neutron Scattering ECNS2015, 64, Zaragoza, Spain, 30.08 – 4.09.2015, poster.
46. N. Górską, **Ł. Hetmańczyk**, E. Mikuli, M. Łabanowska, M. Kurdziel, “Neutrons and Raman scattering, infrared absorption and electron paramagnetic resonance studies of vibration and reorientation dynamics, structural changes and its interrelation with the phase transition in polycrystalline [Cr(urea)₆](BF₄)₃”, VI European Conference on Neutron Scattering ECNS2015, 13, Zaragoza, Spain, 30.08 – 4.09.2015, poster.
47. **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, “Crystal structure and NH₃ dynamics in [Cd(NH₃)₄](ReO₄)₂ studied by neutron scattering methods, Raman light scattering and infrared spectroscopies”, VI European Conference on Neutron Scattering ECNS2015, 14, Zaragoza, Spain, 30.08 – 4.09.2015, poster.
48. A. Kwocz, D. Chudoba, **Ł. Hetmańczyk**, P. Szklarz, A. Filarowski, “To the question of conformational equilibrium and polymorph’s states in the solid state and under the matrix conditions”, International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2", 111, Dubna, Moscow region, Russia, 11.10-15.10.2015, poster.
49. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, “Phase transition, structural changes and H₂O reorientational motion in [Ca(H₂O)₂](ReO₄)₂ studied by neutron scattering methods”, International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2", 117-118, Dubna, Moscow region, Russia, 11.10-15.10.2015, poster.
50. **Ł. Hetmańczyk**, J. Hetmańczyk, „Phase transitions, crystal structure and dynamics of NH₃ ligands and XO₄ anions in [M(NH₃)_{4,6}](XO₄)₂ compounds, M=Zn, Cd, X = Cl, Re”, 18th International Seminar on Neutron Scattering Investigation in Condensed Matter Poznań - May 12-14.2016, referat na zaproszenie.
51. A. Kwocz, J. Panek, A. Jezińska, **Ł. Hetmańczyk**, A. Pawlukojć, A. Kochel, P. Lipkowski, A. Filarowski, “Theoretical and experimental investigations of compounds with cycle-arranged hydrogen bridges”, Modeling & Design of Molecular Materials 2016, 26-30 June 2016, Trzebnica, Poland, poster P15A.
52. J. Hetmańczyk, **Ł. Hetmańczyk**, “Thermal properties, phase transition and vibrational dynamics of polycrystalline [Ca(H₂O)₂](ReO₄)₂” XV International Conference on Thermal Analysis and Calorimetry in Russia (RTAC-2016), 16 – 23 September, 2016 Sankt-Petersburg, Russia, poster PS1.07

10. Praca na rzecz środowiska naukowego

1. Recenzje publikacji w czasopismach naukowych:

- Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2 artykuły

- Spectrochimica Acta Part A, 2 artykuły
 - RSC Advances, 1 artykuł
 - New Journal of Chemistry, 1 artykuł
2. Ekspert Komisji Stypendialnej oceniającej wnioski o przyznanie stypendium w ramach projektu „Doctus – Małopolski fundusz stypendialny dla doktorantów” w ramach PO KL Priorytet VIII Regionalne kadry gospodarki, Działanie 8.2 Transfer Wiedzy, Poddziałanie 8.2.2 Regionalne Strategie Innowacji. Ocena merytoryczna i recenzje wniosków o 2010/2011 (6 wniosków) i 2011/2012 (5 wniosków).
 3. Udział w Konsorcjum Neutrony dla Polskiej Nauki (dawniej ILLPL)

11. Współpraca naukowa

- Zjednoczony Instytut Badań Jądrowych, Laboratorium Fizyki Neutronowej im. I.M. Franka, grupa nieelastycznego rozpraszania neutronów (NERA)
- Wydział Fizyki Uniwersytetu im. A. Mickiewicza w Poznaniu (prof. dr hab. Krystyna Hołderna-Natkaniec, dr Ireneusz Natkaniec).
- Instytut Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie (prof. dr hab. Ewa Ściesińska, mgr Jacek Ściesiński).

12. Działalność dydaktyczna

Prowadzone zajęcia dydaktyczne:

- Podstawy chemii z elementami chemii fizycznej, kierunek Biofizyka, laboratorium i ćwiczenia rachunkowe, 2006-2012
- Spektroskopia molekularna, kierunek Chemia, laboratorium, 2006-2012
- Chemia ogólna i nieorganiczna, kierunek Biologia 2007/8, 2009/10.
- Chemia ogólna i nieorganiczna, kierunek Ochrona Środowiska, 2007-2012
- Chemia ogólna i nieorganiczna - część II, kierunek Neurobiologia, 2009-2012

Rozdziały w książkach i skryptach

Do osiągnięć dydaktycznych zaliczyć należy współautorstwo rozdziałów w dwóch książkach:

- Mikuli, **L. Hetmańczyk**, "Fourierowska spektroskopia w środkowej podczerwieni" w: Wybrane metody spektroskopii i spektrofotometrii molekularnej w analizie strukturalnej, pod. red. K. Małek i L.M. Proniewicza, Wyd. UJ Kraków 2005, format B-5, ISBN 83-233-2014-4. rozdz. 1, str. 11-35.

- W. Łasocha, **Ł. Hetmańczyk**, M. Grzywa, "Dyfrakcja promieni X", [w:] Komplementarne metody badań przemian fazowych pod. red. naukową E. Mikuli i A. Migdał-Mikuli, Wyd. UJ, Kraków 2006, format B-5, ISBN 83-233-2091-8, rozdz. 3, str. 71-90.

Promotorstwo prac magisterskich:

- *Anna Halina Brzezińska, "Badanie właściwości fizykochemicznych podłoża dla wzrostu sadzonek wybranych gatunków drzew hodowlanych w szkółkach leśnych na terenie Nadleśnictwa Gorlice-Zagórzany". Promotor: dr Łukasz Hetmańczyk, 2010.*
- *Katarzyna Bosak "Badanie właściwości fizykochemicznych gleb pod wybranymi gatunkami drzew na szkółkach w Nadleśnictwie Brzesko". Promotor: dr Łukasz Hetmańczyk, 2010.*
- *Paulina Bartosik, "Przejścia fazowe w $[Ca(H_2O)_6]Cl_2$ ". Promotor: dr Łukasz Hetmańczyk, 2010.*
- *Anna Kurdziel, "Analiza wybranych własności fizykochemicznych gleby na terenie szkółki leśnej w Małastowie." Promotor: dr Łukasz Hetmańczyk, 2011.*
- *Patrycja Telejko, "Analiza wybranych własności fizykochemicznych gleby na terenie szkółki leśnej Nadleśnictwa Gorlice-Zagórzany." Promotor: dr Łukasz Hetmańczyk, 2011.*

Opieka naukowa nad studentami poza Wydziałem Chemii UJ

W latach 2012 i 2013 opiekowałem się naukowo dwoma studentami, którzy odbywali miesięczne praktyki w ramach międzynarodowych Letnich Praktyk Studenckich w Zjednoczonym Instytucie Badań Jądrowych w Dubnej. Pod moim kierownictwem zrealizowane zostały dwa projekty naukowe, które były następnie prezentowane (w języku angielskim) na zakończenie praktyk:

- 1 – 22 lipca 2012; Katarzyna Kluczyk "Structure nad molecular reorientation in chlorate(VII) tetraaminazinc(II)".
- 7 – 28 lipca 2013; Kamila Wojszko, Wydział Chemii UJ, "Crystal structure, vibrational spectroscopy and thermal properties studies of $[Cd(NH_3)_4](ReO_4)_2$ and $[Cd(NH_3)_6](ClO_4)_2$ ".

Pozostała działalność dydaktyczna

W latach 2009/2010 oraz 2010/2011 prowadziłem zajęcia ze spektroskopii molekularnej dla studentów Państwowej Wyższej Szkoły Zawodowej w Tarnowie. Przygotowywałem i

prowadziłem (w języku angielskim) ćwiczenie pt. Neutron Scattering Spectroscopy w ramach Advanced Spectroscopy in Chemistry (rok akademicki 2009/2010). Do osiągnięć dydaktycznych zaliczam także wdrażanie nowego programu ćwiczeń laboratoryjnych z chemii ogólnej z elementami chemii fizycznej dla kierunku biofizyka a także sprawdzanie i poprawianie prac uczestników **57 i 58 Olimpiady Chemicznej (I i II etap)** w latach 2010 i 2011.

13.Działalność organizacyjna

Pełnione funkcje:

2009 –04.2012: sekretarz V kadencji Zarządu Fundacji „PRO CHEMIA”

2006 – 2008:członek IV kadencji Zarządu Fundacji „PRO CHEMIA”

2005 – nadal: członek Wydziałowej Drużyny OC (osoba funkcyjna na wypadek ewakuacji)

Praca na rzecz Wydziału Chemii UJ:

- ✓ Organizacja i uruchomienie Laboratorium Ciekłych Kryształów w ramach projektu "*Badanie układów w skali atomowej: nauki ścisłe dla innowacyjnej gospodarki (ATOMIN) POIG.02.01.00-12-023/08*" - zakup spektrometru do dalekiej i środkowej podczerwieni z kriostatem, kompresorem helowym i prasą hydrauliczną.
- ✓ Praca przy projektowaniu pomieszczeń Zespołu Badań Przemian Fazowych w nowym budynku Wydziału Chemii UJ.
- ✓ Pomoc w organizacji prezentacji Wydziału Chemii podczas Jagiellońskiego Festiwalu Nauki (2001).
- ✓ Pomoc przy organizacji konferencji European Crystallographic Meeting ECM20 „Crystallography in Natural Sciences and Technology (2001 rok).
- ✓ Projekt plakatu reklamującego Wydział Chemii podczas Jagiellońskiego Festiwalu Nauki w 2003 roku.
- ✓ Projekt folderu z okazji 10-lecia działalności Fundacji „PRO CHEMIA” (2006 rok).
- ✓ Pomoc przy Wojewódzkim Konkursie Wiedzy Chemicznej (2009 rok).
- ✓ Pomoc przy organizacji obchodów z okazji XXX-lecia istnienia Wydziału Chemii - przygotowanie plakatu reklamującego Zakład Fizyki Chemicznej.
- ✓ Uczestnictwo w Dniu Otwartym Wydziału Chemii UJ w roku 2010 (demonstracja spektrometru IR).

- ✓ Prezentacja spektrometru do podczerwieni w ramach I Ogólnopolskiego Forum Młodych Chemików w 2011 roku.
- ✓ Promocja projektu ATOMIN - wystąpienie na seminarium w Zakładzie Inżynierii Nowych Materiałów w Instytucie Fizyki UJ w dniu 22.04.2010r.

Łukasz Hebrniak