

## **AUTOREFERAT**



**Elżbieta Szostak**  
**Wydział Chemii**  
**Uniwersytet Jagielloński**

**Kraków 2017**

## Spis treści

<b>Część A: Informacje o przebiegu kariery naukowej habilitanta .....</b>	<b>4</b>
A.1. Dane Osobowe .....	4
A.2. Wykształcenie dyplomy i stopnie naukowe .....	4
A.3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych.....	5
A.4. Staże .....	5
A.5. Inne kwalifikacje.....	5
<b>Część B: 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.).....</b>	<b>6</b>
B.1. Tytuł osiągnięcia naukowego .....	6
B.2. Prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego.....	6
B.3. Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania .....	12
1. Wstęp i motywacja do podjęcia badań.....	12
2. Metodyka badań.....	15
3. Charakterystyka związków typu $[M(DMSO)_6](ClO_4)_2$ .....	15
4. Preparatyka związków.....	16
5. Zakres trwałości badanych związków [H1-H5].....	17
6. Badania polimorfizmu próbek [H1-H9].....	18
7. Badanie mechanizmu przemian fazowych [H4-H12].....	23
7.1. Badania strukturalne [H6,H8-H11].....	24
7.2. Badania reorientacji molekularnej [H4-H9,H11-H12] .....	26
7.3. Badania charakteru metastabilnego przemian [H12].....	31
B.4. Podsumowanie – najważniejsze osiągnięcia i elementy nowości naukowej.....	33
<b>Część C: Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych.....</b>	<b>34</b>
C.1. Działalność naukowa przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora .....	34
C.2. Działalność naukowa po uzyskaniu stopnia naukowego doktora.....	34
C. 3. Dorobek publikacyjny wraz z analizą bibliometryczną.....	36
1. Dane bibliometryczne.....	36
2. Publikacje poza cyklem wymienionym w punkcie B.2 opublikowane w czasopismach znajdujących się w bazie JCR.....	37
3. Książki i monografie.....	42
4. Publikacje w czasopismach i materiałach spoza bazy JCR.....	43

5. Udział w konferencjach naukowych.....	45
C.4. Nagrody i wyróżnienia .....	48
C.5. Projekty badawcze .....	48
C.6. Współpraca krajowa i zagraniczna .....	49
C.7. Recenzje prac naukowych.....	50
C.8. Pełnienie roli eksperta.....	50
<b>Część D: Podsumowanie najważniejszych aspektów działalności, dydaktycznej organizacyjnej i eksperckiej. ....</b>	<b>51</b>
D.1. Działalność dydaktyczna.....	51
1. Wykłady, seminaria i ćwiczenia laboratoryjne .....	51
2. Zajęcia dydaktyczne nie objęte programem studiów kierunkowych .....	51
3. Kształcenie młodej kadry naukowej.....	52
3.1. Zrealizowane prace licencjackie .....	52
3.2. Zrealizowane prace magisterskie.....	52
D.2. Działalność organizacyjna .....	<b>Błąd! Nie zdefiniowano zakładki.</b>

## Część A: Informacje o przebiegu kariery naukowej habilitanta

### A.1. Dane Osobowe

<i>Imię i nazwisko:</i>	Elżbieta Szostak
<i>Stopień naukowy:</i>	doktor
<i>Adres domowy:</i>	Pawlikowice 444, 32-020 Wieliczka
<i>Telefon:</i>	782 686 423
<i>Data i miejsce urodzenia:</i>	17. XI. 1976 Kraków
<i>Miejsce stałego zatrudnienia:</i>	Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii Zakład Dydaktyki Chemii ul. Ingardena 3, 30-060 Kraków Tel. 12 663 22 65
<i>e-mail:</i>	szostak@chemia.uj.edu.pl

### A.2. Wykształcenie dyplomy i stopnie naukowe

<i>Wyższe</i>	<i>1995-2000 r.</i>	Studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Kierunek: chemia. Praca magisterska pt.: „Oznaczanie stężenia jonów potasowych przy użyciu potasowej elektrody jonoselektywnej z membraną ciekłą”, wykonana w Zespole Elektrochemii Promotor: dr Tadeusz Bieszczad.
	<i>2000 r.</i>	Stopień naukowy: magister chemii.
<i>Doktorat</i>	<i>2000-2005 r.</i>	Stacjonarne studia doktoranckie, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Chemii, Zakład Fizyki Chemicznej, Zespół Badań Przemian Fazowych Rozprawa doktorska pt.: „Badanie przemian fazowych i reorientacji molekularnej w wybranych związkach typu $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ ; gdzie $M = \text{Cd}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Mn}^{2+}$ i $\text{Zn}^{2+}$ ” Promotor: Prof. dr hab. Anna Migdał-Mikuli.
	<i>2005 r.</i>	Stopień naukowy: doktor nauk chemicznych.

### A.3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

*Asystent*                      10.2005 r. – 10.2008 r.      Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

*Adiunkt*                      10.2008 r. – do chwili      Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii Uniwersytet obecnej                      Jagielloński w Krakowie

### A.4. Staże

XII 2006	Staż badawczy w Laboratorium Zakładu Technologii Chemicznej i Inżynierii Materiałowej Uniwersytetu Przyrodniczo-Humanistycznego w Siedlcach.
IX 2010	Staż badawczy w Laboratorium Zakładu Fizyki Wysokich Ciśnień Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu.
XII 2012 do II 2012	Staż naukowo-techniczny w F.P.H.U. OSKAR Kinga Rogoda w ramach projektu dofinansowanego ze środków Unii Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego „Wzmocnienie przedsiębiorczości oraz świadomości w zakresie współpracy nauka-biznes wśród małopolskich pracowników naukowych sposobem na wzrost innowacyjności i konkurencyjności małopolskich firm”
X 2012	Staż badawczy w Laboratorium Węgierskiej Akademii Nauk w Budapeszcie.
I-III 2013	Staż w przedsiębiorstwie Consil Polska Sp. z o.o. ul. Ostania 2F/25, 31-444 Kraków w ramach projektu SPIN – Skuteczny Przedsiębiorca i Naukowiec.
II 2014	Staż w Instytucie Niskich Temperatur PAN we Wrocławiu.

### A.5. Inne kwalifikacje

Doświadczenie w pracy pedagogicznej na stanowisku nauczyciel chemii w Katolickim LO im. Świętej rodziny z Nazaretu.

## Część B: 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.)

Podstawą postępowania habilitacyjnego jest jednotematyczny cykl prac, składający się z 12 publikacji indeksowanych w bazie Journal Citation Reports (JCR).

### B.1. Tytuł osiągnięcia naukowego

Badanie i charakterystyka przemian fazowych obecnych w kryształach jonowych z fazą plastyczną.

### B.2. Prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego

\* – oznaczenie autora do korespondencji

IF – podano wg JCR zgodnie z rokiem opublikowania (podano aktualny IF średni pięcioletni)

cyt. = liczba cytowań wg Web of Science z dnia 20.05.2017

Lp.	Publikacje	IF wg bazy JCR		PKT MNI SW (lista A)	Liczba cytowań	Udział w pracy / %
		z roku wydania	5-cio letni			
H1	Anna Migdał-Mikuli*, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase polymorphism of [Zn(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Thermochim. Acta, 444 (2006) 195 - 200.</b> <b>Udział własny 48%:</b> koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości (stosowane metody: analiza elementarna, miareczkowanie, analiza widm absorpcyjnych (IR) i ramanowskich (RS), pomiary termogravimetryczne (TG)), zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	1.417	2.341	30	11	48

H2	Anna Migdał-Mikuli*, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase polymorphism of [Ni(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Z. Naturforsch. A., 62a (2007) 67-74.</b> <b>Udział własny 48%:</b> koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	0.691	0.747	20	9	48
H3	<b>Elżbieta Szostak*</b> , Anna Migdał-Mikuli <i>Phase polymorphism and thermal decomposition of hexadimethylsulphoxidemagnesium(II) chlorate(VII)</i> <b>J. Therm. Anal. Cal. 101 (2010) 601-606.</b> <b>Udział własny 70%:</b> koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC i TG wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.	1.752	1.617	25	6	70
H4	Anna Migdał-Mikuli, <b>Elżbieta Szostak*</b> , Paweł Bernard <i>Thermal analysis, phase transitions and molecular reorientations in [Sr(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub></i> <b>J. Therm. Anal. Cal. 115 (1) (2014) 443-449.</b> <b>Udział własny 60%:</b> koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości, zaplanowanie wszystkich pomiarów prezentowanych w pracy wraz z ich interpretacją, wykonanie pomiarów DSC i IR, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.	2.042	1.617	25	7	60

<p><b>H5</b></p>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli  <i>Thermal analysis, phase transitions and molecular reorientations in [Fe(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub></i>  <b>J. Therm. Anal. Cal.</b>  <b>DOI 10.1007/s10973-017-6181-z</b>  <b>Udział własny 70%:</b> koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC i IR wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	<p><b>1.781</b></p>	<p><b>1.617</b></p>	<p><b>25</b></p>	<p><b>0</b></p>	<p><b>70</b></p>
<p><b>H6</b></p>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli, Agnieszka Kaczor, Wojciech Nitek  <i>Low-temperature phase transition in [Mn(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, studied by single crystal X-ray diffraction, infrared absorption and Raman scattering spectroscopies</i>  <b>Spectrochim. Acta, Part A 79(5) (2011) 1179-1186.</b>  <b>Udział własny 50%:</b> koncepcja badań, zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów IR wraz z ich interpretacją, zaplanowanie pomiarów RS, opracowanie i interpretacja wyników uzyskanych z pomiarów RS, napisanie wstępnej wersji całości artykułu, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	<p><b>2.098</b></p>	<p><b>2.582</b></p>	<p><b>30</b></p>	<p><b>8</b></p>	<p><b>50</b></p>
<p><b>H7</b></p>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli, Krystyna Hołderna-Natkaniec, Roman Gwoździk-Bujakowski, Agnieszka Kaczor  <i>Phase transitions and molecular reorientations in [Mn(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by proton magnetic resonance and Raman spectroscopy</i>  <b>J. Coord. Chem. 65 (15) (2012) 2732-2742.</b>  <b>Udział własny 50%:</b> koncepcja badań, zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów IR wraz z ich interpretacją, zaplanowanie pomiarów RS, opracowanie i interpretacja wyników uzyskanych z pomiarów RS, napisanie wstępnej wersji artykułu, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	<p><b>1.801</b></p>	<p><b>1.341</b></p>	<p><b>25</b></p>	<p><b>3</b></p>	<p><b>50</b></p>



H8	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Joanna Hetmańczyk, Anna Migdał-Mikuli</p> <p><i>Inelastic and elastic neutron scattering studies of the vibrational and reorientational dynamics, crystal structure and solid-solid phase transition in <math>[Mn(OS(CH_3)_2)_6](ClO_4)_2</math> supported by theoretical (DFT) calculation</i></p> <p><b>Spectrochim. Acta, Part A 145 (2015) 368-375.</b></p> <p><b>Udział własny 40%:</b> koncepcja badań, zaplanowanie pomiarów, napisanie i złożenie „proposalu” na wykonanie pomiarów w Dubnej, synteza próbki, charakterystyka parametrów strukturalnych próbki, wykonanie i opracowanie widm MIR i FIR, wspólna redakcja tekstu końcowego publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	2.653	2.582	30	3	40
H9	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Joanna Hetmańczyk, Anna Migdał-Mikuli</p> <p><i>Low-temperature phase transition in <math>[Cd(OS(CH_3)_2)_6](ClO_4)_2</math> studied by inelastic and elastic neutron scattering, Raman light scattering, and infrared absorption spectroscopy</i></p> <p><b>Vib. Spectrosc. 84 (2016) 83-91.</b></p> <p><b>Udział własny 60%:</b> koncepcja badań, synteza próbki, zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów IR i RS wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji artykułu, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	1.682	1.968	25	0	60
H10	<p>Anna Migdał-Mikuli, <b>Elżbieta Szostak*</b>, Wojciech Nitek</p> <p><i>Hexakis(dimethyl sulfoxide)manganese(II) bis(perchlorate)</i></p> <p><b>Acta Cryst. E62 (2006) m2581-m2582.</b></p> <p><b>[DOI:10.1107/S1600536806036026]</b></p> <p><b>Udział własny 50%:</b> koncepcja badań, synteza próbki i analiza jej składu, zaplanowanie pomiarów dyfrakcyjnych (XRSCD), napisanie wstępnej wersji całości artykułu, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	0.567	0.278	-	11	50

<p><b>H11</b></p>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli  <i>Phase polymorphism of [Zn(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by vibrational spectroscopy</i>  <b>Spectrochim. Acta, Part A 131 (2014) 365-372.</b>  <b>Udział własny 70%:</b> koncepcja badań, zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów MIR i FIR, opracowanie i interpretacja wyników uzyskanych z przeprowadzonych pomiarów, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	<p><b>2.353</b></p>	<p><b>2.582</b></p>	<p><b>30</b></p>	<p><b>1</b></p>	<p><b>70</b></p>
<p><b>H12</b></p>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli, Kinga Orwat  <i>Vibrational spectroscopy studies of solid-solid phase transitions in [Mg(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> and in its deuterated analogue</i>  <b>Vib. Spectrosc. 89 (2017) 123-130.</b>  <b>Udział własny 70%:</b> koncepcja badań, synteza próbek, zaplanowanie wszystkich pomiarów prezentowanych w pracy wraz z ich interpretacją, wykonanie wszystkich pomiarów DSC i większej części pomiarów IR, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	<p><b>1.682</b></p>	<p><b>1.968</b></p>	<p><b>25</b></p>	<p><b>0</b></p>	<p><b>70</b></p>

**Parametry osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego**

➤ <b>Sumaryczny IF wg roku wydania dla publikacji z bazy JCR:</b>	<b>20.519</b>
➤ Sumaryczny 5-cio letni IF dla publikacji z bazy JCR:	21.24
➤ Suma punktów MNiSW (lista A)	290
➤ <b>Średni IF wg roku wydania dla publikacji z bazy JCR:</b>	<b>1.71</b>
➤ Średni 5-cio letni IF dla publikacji z bazy JCR:	1.77
➤ Średnia liczba punktów MNiSW	24.2
➤ <b>Średni deklarowany udział Habilitanta</b>	<b>57%</b>

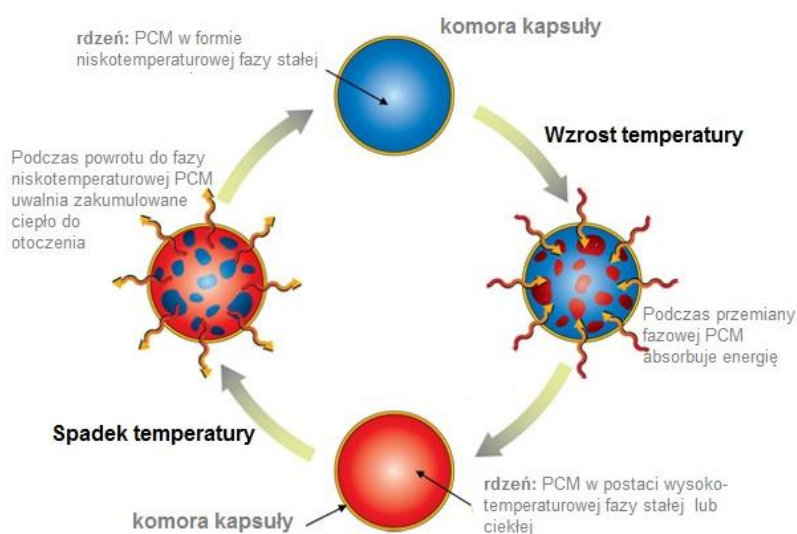
### B.3. Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

#### 1. Wstęp i motywacja do podjęcia badań

Właściwa gospodarka energetyczna kraju zapewniająca odbiorcom nieprzerwane i pewne dostawy energii leżą u podstaw jego wzrostu gospodarczego i poprawy warunków życia w Państwie. Przy obecnym tempie rozwoju technologicznego i wszechobecnej automatyzacji pracy maszyn wydaje się oczywistym, iż dalszy wzrost zapotrzebowania na energię tak w Polsce, jak i na całym świecie jest zjawiskiem nieuniknionym. W chwili obecnej zapotrzebowanie energetyczne naszego kraju pokrywane jest głównie na drodze wykorzystania paliw konwencjonalnych typu: węgiel kamienny, gaz ziemny i ropa naftowa. Choć wydawać by się mogło, iż ze względów ekonomicznych (istniejące już elektrownie, funkcjonujące od lat źródła przesyłu, sprawdzona forma zabezpieczenia dostaw) rozwiązania te są jak najbardziej racjonalne pamiętać należy także, iż zasoby o których mowa należą do źródeł nieodnawialnych. Biorąc pod uwagę ograniczoność wykorzystywanych źródeł, oraz samą ekonomię ich stosowania kolejnym istotnym aspektem jest zjawisko bezpowrotnego rozpraszania energii. Znaczne ilości energii są m.in. tracone podczas pracy elektrowni węglowych. Energia ta nie jest zazwyczaj odzyskiwana, choć zjawisko to byłoby procesem wysoce pożądanym.

Uwzględniając wszystkie wymienione wyżej przesłanki nie trudno zauważyć jak ważne jest opracowanie i wdrożenie nowych materiałów mogących pełnić funkcję alternatywnych nośników energii lub jej akumulatorów.

Jedną z najbardziej perspektywicznych metod na zwiększenie efektywności wykorzystania energii cieplnej jest stosowanie tak zwanych materiałów magazynujących energię (ang. Thermal Energy Storage - TES).<sup>1,2</sup> Materiałami o takich właściwościach są materiały zmiennofazowe (ang. PCM – phase-change material).<sup>3</sup> Istotą działania tego typu materiałów jest występowanie w nich przemian fazowych charakteryzujących się dużymi



Rys. 1. Schemat działania materiałów zmiennofazowych.

Zaczerpnięto z: <http://www.microteklabs.com/how-do-pcms-work.html>

<sup>1</sup>Camila Barreneche, Helena Navarro, Susana Serrano, Luisa F. Cabeza, A. Inés Fernández, Energy Procedia, 57 (2014) 2408 – 2415.

<sup>2</sup>Bo Chen, Tian-Hui Liu, Huan Jiao, Xi-Ping Jing, Phase Transitions, 87 (7) (2014) 629 – 640.

<sup>3</sup>Belen Zalba, Jose M. Marin, Luisa F. Cabeza, Harald Mehling, Applied Thermal Engineering, 23 (2003) 251–283.

wartościami ciepła utajonego. Dzięki wspomnianym właściwościom PCM są w stanie zarówno akumulować jak i uwalniać dużą ilość energii w zakresie temperatury przemiany fazowej (Rys. 1.). Materiały PCM i ich możliwości aplikacyjne stanowią przedmiot zainteresowania takich dziedzin gospodarki jak przemysł budowniczy, transportowy, elektroniczny, samochodowy czy medyczny.<sup>4</sup> Dlatego tak istotne wydają się badania i charakterystyka tego typu substancji, a także zrozumienie istoty mechanizmu ich działania.

Celem nadrzędnym niniejszej rozprawy habilitacyjnej była synteza i charakterystyka polimorfizmu fazowego związków zmiennofazowych typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  (gdzie M jest jonem metalu dwuwartościowego, a DMSO to dimetylosulfotlenek o wzorze  $(\text{CH}_3)_2\text{SO}$ ).

W badaniach szczególny nacisk położono na określenie zakresu temperaturowego w jakim trwałe są zsyntezowane substancje, zarejestrowanie przejść fazowych zachodzących w ramach fazy stałej oraz punktów topnienia badanych substancji, wykrycie ewentualnej histerezy temperaturowej przejść fazowych, obliczenie parametrów termodynamicznych tych przejść, a następnie na rozszyfrowanie powiązań wykrytych przejść fazowych ze zmianą charakterystyki czasowej ruchów molekularnych i/lub ze zmianą struktury krystalicznej. Zabiegi te miały na celu określenie potencjału magazynującego zsyntezowanych połączeń w oparciu, o który dokonano oceny możliwości użycia zsyntezowanych połączeń jako materiałów magazynujących energię.

Zastosowanie związku organicznego w charakterze ligandu stanowiło w tym wypadku innowację w stosunku do badanych wcześniej w naszym *Zespole Badań Przemian Fazowych* analogicznych połączeń z ligandami  $\text{H}_2\text{O}$  i  $\text{NH}_3$ . Jak się później okazało, miało też kolosalny wpływ na właściwości zsyntezowanych połączeń. Już pierwsze z prowadzonych metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej (DSC) badań wykazały, iż w przeciwieństwie do związków „czysto” nieorganicznych, sytuacja fazowa w związkach typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  jest bardziej skomplikowana i silnie zależy od tzw. „historii termicznej” próbki. Związki te charakteryzuje duże bogactwo odmian polimorficznych, a przemiany fazowe ciało stałe/ciało stałe mogą w nich zachodzić zarówno w obrębie faz stabilnych, jak i metastabilnych. Pełna charakterystyka tego typu układów wymagała więc wykonania pomiaru i analizy wielu krzywych DSC, uzyskanych dla próbek różnej masy, przy różnych tempach skanowania i różnych zakresach temperatur pomiarowych.

Uważny czytelnik może zadać w tym miejscu pytanie jaki sens ma badanie związków, których sytuacja fazowa tak silnie zależy od warunków pomiarowych. Otóż istnieją dwie przesłanki, do podjęcia rozważań nad wyżej wspomnianymi układami. Pierwszą z nich jest bogactwo występujących w nich odmian polimorficznych oraz zakres temperaturowy w jakich przemiany te występują ( $T < 373 \text{ K}$ ). Zakres ten pokrywa się bowiem z przedziałem temperaturowym w jakim ciepło utajone jest uwalniane ze związków typu TES. Drugą znacznie bardziej interesującą kwestią z punktu widzenia badawczego jest fakt, iż parametry termodynamiczne wykrytych przejść wskazały, iż niektóre z pojawiających się faz wykazują podobieństwo do faz rotacyjnych, zwanych również „kryształami plastycznymi”, bądź też do faz charakteryzujących się wysokim stopniem nieporządku orientacyjnego (ODIC).<sup>5,6,7</sup>

<sup>4</sup>H. Mehling, L. Cabeza, ISBN 978-3-540-68556-2; Springer, 2008.

<sup>5</sup>R. M. Lynden Bell and K. H. Michel, *Rev. Mod. Phys.*, 66 (1994) 721–762.

<sup>6</sup>J. Even, L. Pedesseau and C. Katan, *J. Phys. Chem. C*, 118 (2014) 11566–11572.

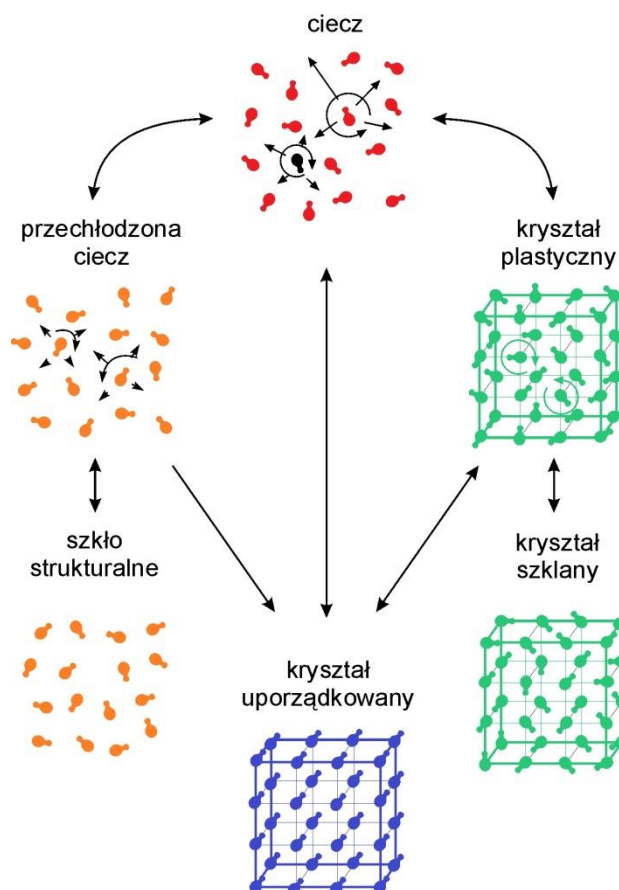
<sup>7</sup>J. Even, *J. Phys. Chem. Lett.*, 6 (2015) 2238–2242.

Kryształy plastyczne podobnie jak ciekłe kryształy stanowią stan pośredni pomiędzy kryształem uporządkowanym a jego formą ciekłą. W kryształach plastycznych podobnie jak w klasycznych kryształach środkom mas molekuł można przypisać ściśle zdefiniowane i periodycznie powtarzające się położenia w sieci. Molekuły te cechuje jednak dynamiczne nieuporządkowanie względem rotacyjnych stopni swobody co powoduje, iż wykonują one prawie swobodną rotację lub przynajmniej bardzo szybkie stochastyczne ruchy reorientacyjne.<sup>8,9,10,11</sup> Schładzanie kryształu plastycznego prowadzi do jego porządkowania przy czym zjawisko to może zachodzić na dwa różne sposoby (Rys. 2).<sup>12</sup>

W przypadku pierwszym obniżanie temperatury powoduje spowolnienie, a następnie zamrożenie w określonej temperaturze reorientacji molekuł. Przemianę taką nazywamy orientacyjnym przejściem szklistym a powstałą w niej fazę „szkłem orientacyjnym” (ang. *Oriental Glasses - OG*) lub „szklanym kryształem”. W przypadku drugim schładzanie kryształu plastycznego prowadzi do strukturalnej przemiany fazowej prowadzącej do utworzenia kryształu częściowo bądź całkowicie uporządkowanego. Porządkowanie molekuł ma miejsce także podczas schładzania faz ciekłych, przy czym z uwagi na nieporządek translacyjno-reorientacyjny molekuły takie mogą transformować do stanu zwanego „szkłem strukturalnym”, bądź bezpośrednio do kryształu uporządkowanego.

Zgodnie z definicją Timmermans'a<sup>8</sup> charakter plastyczny wykazują kryształy w których poza przemianą ciało stałe-ciecz (tzn. topnieniem próbki) odnotowano też obecność przejścia fazowego typu porządek-nieporządek (*order-disorder*) o dużej wartości ciepła utajonego. Powszechnie przyjmuje się, że zmiana entropii w procesie topnienia kryształu plastycznego jest stosunkowo mała i nie przekracza wartości  $\Delta S_t = 21 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ . Z kolei wartość zmiany entropii przy przejściu fazy plastycznej (rotacyjnej) do fazy uporządkowanej powinna przekraczać  $75 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$  co daje wynik zbliżony do tradycyjnego topnienia kryształu.

Kryterium Timmermans'a w przypadku nietypowych kryształów plastycznych zbudowanych z molekuł nie wykazujących swobodnej rotacji, a jedynie znaczny dynamiczny niepo-



Rys. 2. Diagram obrazujący przemiany zachodzące z udziałem kryształów plastycznych wg E. Mikuli [12].

<sup>8</sup>J. Timmermans, J. Phys. Chem. Solids, 18 (1961) 1–8.

<sup>9</sup>K. Adachi, H. Suga, S. Seki, Bull. Chem. Soc. Jpn., 41 (1968) 1073–1087.

<sup>10</sup>J. Even, M. Carignano, C. Katan, Nanoscale, 8 (2016) 6222–6236.

<sup>11</sup>J. I. Koga, T. Odagaki, J. Phys. Chem. B, 104 (2000) 3808–3811.

<sup>12</sup>E. Mikuli, Niedziałki; ISSN 1425-8994, 2 (2006) 28-34.



rządek orientacyjny może ulec znacznemu osłabieniu o czym możemy przeczytać w pracy Jennifer M. Pringle.<sup>13</sup>

Jako, że substancje krystaliczne o właściwościach plastycznych nie były dotąd szeroko badane w naszym zespole ostatnim z założonych w pracy habilitacyjnej celów była próba wyjaśnienia natury i przyczyn zmian zachodzących w przejściach fazowych kryształów uporządkowany – kryształ plastyczny.

## 2. Metodyka badań

Na drodze do osiągnięcia założonych w pracy celów do badań wykorzystano następujące metody badawcze:

- ✓ analiza elementarna i kompleksometryczna,
- ✓ różnicowa analiza termiczna (DTA),
- ✓ skaningowa kalorymetria różnicowa (DSC),
- ✓ spektroskopia absorpcyjna w dalekiej i środkowej podczerwieni (FIR i MIR),
- ✓ spektroskopia ramanowska (RS),
- ✓ niespójne, nieelastyczne i quasielastyczne rozpraszanie neutronów (IINS i QENS),
- ✓ magnetyczny rezonans jądrowy (szerokość i drugi moment linii <sup>1</sup>H NMR),
- ✓ dyfrakcja neutronów (NPD) i dyfrakcja promieni X (XRSCD).

W części właściwej autoreferatu stosowane techniki pomiarowe cytowane będą często z uwzględnieniem ich skrótów literowych. W rozprawie zaprezentowane i omówione szczegółowo zostaną WYBRANE wyniki badań najbardziej istotne z punktu widzenia niniejszej rozprawy.

## 3. Charakterystyka związków typu [M(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

Związki kompleksowe będące przedmiotem niniejszej rozprawy habilitacyjnej, nie były dotąd szeroko badane. Jedynymi informacjami dostępnymi w zakresie podjętej tematyki, była preparatyka i struktura krystaliczna połączeń przedstawionych w Tabeli 1.<sup>14,15,16,17,18,19</sup>

Sytuacja taka niejednokrotnie stwarzała konieczność, odwoływania się do wyników własnych autorki w trakcie zgłębiania badanej tematyki, do których zaliczyć można też prace opublikowane w ramach podjętej przez nią wcześniej rozprawy doktorskiej.<sup>20,21</sup>

<sup>13</sup>J. M. Pringle, Phys. Chem. Chem. Phys., 15 (2013) 1339-1351.

<sup>14</sup>I. Persson, Acta. Chem. Scand., 36a (1982) 7-13.

<sup>15</sup>M. Calligaris, O. Carugo, Coord. Chem. Rev., 153 (1996) 83-154.

<sup>16</sup>E.J. Chan, B.G. Cox, J.M. Harrowfield, M.I. Ogden, B.W. Skelton, A.H. White, Inorg. Chim. Acta, 357 (2004) 2365-2373.

<sup>17</sup>T.U. Lubeznova, I. Ponomariew, Krystallografia, 34 (1989) 862-869.

<sup>18</sup>M Sandström, Acta Chem. Scand., A 32 (1978) 519-525.

<sup>19</sup>J. M. Harrowfield, W. R. Richmond, B. W. Skelton, A. H. White, European Journal of Inorganic Chemistry, 2004 (2) (2004) 227-230.

<sup>20</sup>A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, E. Szostak, J. Serwońska, Z. Naturforsch 58a (2003) 341 - 345.

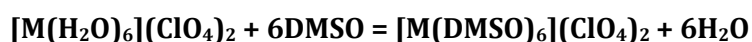
<sup>21</sup>A. Migdał-Mikuli, E. Szostak, Z. Naturforsch., 60a (2005) 289 - 295.

**Tabela 1.** Parametry krystalograficzne związków typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  uzyskane w oparciu o dostępne dane literaturowe.

Wzór związku	298 K	246 K
$[\text{Zn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	Układ trygonalny	
$[\text{Ni}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	Grupa przestrzenna P31c	
$[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	Układ rombowy Grupa przestrzenna Fd2d	Układ jednoskośny Grupa przestrzenna C2/c
$[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	Układ trójskośny Grupa przestrzenna $P\bar{1}$	

#### 4. Preparatyka związków

Syntezę związków kompleksowych typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  prowadzono w oparciu o następujące równanie reakcji chemicznej:



Polegała ona na bardzo ostrożnym (z uwagi na możliwość wybuchu) rozpuszczeniu na gorąco kilku gramów odpowiednich soli uwodnionych w niewielkiej ilości bezwodnego dimetylosulfotlenku. Bardzo istotnym elementem w trakcie prowadzonej syntezy był właściwy dobór objętości stosowanego rozpuszczalnika. Objętość ta dobrana musiała, być w ten sposób, by nie powodować całkowitego rozpuszczenia soli uwodnionej w temperaturze pokojowej a dopiero w temperaturze około 353K. Warunki takie podyktowane są faktem, iż DMSO wykazuje bardzo dużą zdolność rozpuszczania soli uwodnionych, a ich ponowna krystalizacja w przypadku zastosowania nadmiaru rozpuszczalnika jest bardzo czasochłonna, a niekiedy nawet niemożliwa. Po schłodzeniu otrzymanego roztworu nasyconego do temperatury pokojowej wytrącone kryształy  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  odsączano i wstępnie suszono w szczelnie zamkniętym eksykatorze nad tlenkiem fosforu(V). Po wstępnym osuszeniu otrzymanych osadów wymienione wyżej czynności powtarzano kilkakrotnie w celu wysycenia strefy koordynacyjnej kompleksu. O czystości ostatecznego produktu syntezy wnioskowano w oparciu o wyniki uzyskane metodą analizy kompleksometrycznej, elementarnej i spektroskopowej (widma FT-MIR i FT-RS).

Otrzymane związki kompleksowe typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wykazywały zdolność adsorbowania wody z powietrza dlatego też należało je przechowywać w szczelnie zamkniętych korkiem z tworzywa sztucznego fiolkach szklanych.



## 5. Zakres trwałości badanych związków [H1-H5]

Badania właściwe polimorfizmu próbek poprzedzono określeniem zakresów ich trwałości termicznej. Wyniki uzyskane dla wszystkich badanych układów, w formie zbiorczej zaprezentowano w Tabeli 2.

**Tabela 2.** Zestawienie sumaryczne otrzymane w oparciu o dane szczegółowe przedstawione w pracach [H1-H5].

	Zakres trwałości próbki	Pośrednie formy trwałe	Temp. topnienia próbki wyznaczona metodą DSC	Temp. eksplozji próbki
$[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 400 K		488 K	452 K
$[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 393 K		465 K	493 K
$[\text{Zn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 370 K	$[\text{Zn}(\text{DMSO})_5](\text{ClO}_4)_2$ (DSC – 389 K)	456 K	460 K
$[\text{Ni}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 400 K	$[\text{Ni}(\text{DMSO})_5](\text{ClO}_4)_2$ (DSC – 459 K)	525 K	530 K
$[\text{Fe}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 385 K	$[\text{Fe}(\text{DMSO})_4](\text{ClO}_4)_2$ (DSC – 414 K)	–	513 K
$[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 431 K	$[\text{Mg}(\text{DMSO})_4](\text{ClO}_4)_2$ (DSC – 461 K)	–	504 K
$[\text{Sr}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$	300 – 363 K		–	492 K

Jak wskazały wyniki pomiarów termogravimetrycznych wszystkie zsyntezowane próbki wykazywały tendencję do eksplozji w temperaturach wyższych od 450 K. Związkiem o największej trwałości był  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ . Dla tego związku udało się także zaproponować pełny mechanizm jego rozkładu, którego produktem końcowym był siarczan(VI) magnezu (Tabela 3) [H3].

**Tabela 3.** Parametry charakteryzujące rozkład termiczny  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  [H3].

Wyróżnione zakresy	Zakres temp. [K]	Zachodzące w układzie reakcje/obecne w układzie cząsteczki
Trwałość próbki	300 – 431 K	$[\text{Mg}((\text{CH}_3)_2\text{SO})_6](\text{ClO}_4)_2$
I etap rozkładu	432 – 501	$[\text{Mg}((\text{CH}_3)_2\text{SO})_6](\text{ClO}_4)_2 \rightarrow [\text{Mg}((\text{CH}_3)_2\text{SO})_4](\text{ClO}_4)_2 + 2(\text{CH}_3)_2\text{SO}$
II etap rozkładu	502 – 650 K	$(\text{CH}_3)_2\text{SO} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{OH} + \cdot\text{CH}_3$ $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})\text{OH} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{S}(\text{O})(\text{OH})_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{S}(\text{O})_2\text{OH} + \text{HO}_2$ $\text{CH}_3\text{S}(\text{O})_2\text{OH} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4 + \cdot\text{CH}_3$ $[\text{Mg}((\text{CH}_3)_2\text{SO})_4](\text{ClO}_4)_2 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow 4(\text{CH}_3)_2\text{SO} + \text{MgSO}_4 + \text{Cl}_2 + 4\text{O}_2 + \text{H}_2$
Pozostałość po rozkładzie	651 – 673	$\text{MgSO}_4$

Najmniejszą z badanych związków trwałością termiczną odznaczał się  $[\text{Sr}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  [H4]. Związki kompleksowe zawierające jony  $\text{Zn}^{2+}$  [H1],  $\text{Ni}^{2+}$  [H2],  $\text{Fe}^{2+}$  [H5] i  $\text{Mg}^{2+}$  [H3] wykazywały tendencję do tworzenia trwałych form pośrednich odpowiednio 5 i 4 koordynacyjnych przed osiągnięciem ich temperatury topnienia. W przypadku prowadzenia pomiarów w naczynkach hermetycznie zamkniętych (pomiar DSC) proces odszczepiania i ponownego wbudowywania w strefę koordynacji ligandu DMSO był procesem odwracalnym (patrz Tabela 2). W warunkach zamkniętych i przy odpowiednio dużym tempie skanowania (pomiar DSC) możliwe, było też wyznaczenie temperatury topnienia związku zawierającego jony  $\text{Mn}^{2+}$ , który podczas prowadzenia pomiarów w warunkach otwartych (pomiar TG) wybuchł przed osiągnięciem temperatury topnienia.<sup>22</sup>

## 6. Badania polimorfizmu próbek [H1-H9]

Sytuację fazową próbek badano metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej. Wyniki uzyskane dla wszystkich badanych układów, w formie zbiorczej zaprezentowano w Tabeli 4.

<sup>22</sup> A. Migdał-Mikuli, E. Szostak, Z. Naturforsch., 60a (2005) 289 - 295.

**Tabela 4.** Liczba i rodzaj wykrytych odmian polimorficznych w kryształach typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  [H1-H9].

M	Struktura krystaliczna próbki w 298 K	Liczba wykrytych faz w T < 300 K	Liczba wykrytych faz w T > 300 K	
			stabilnych	metastabilnych
Mn	NIEZNANA	2	3 w tym 2 ODIC	2 W tym 1 ODIC
Cd	u.k. rombowy g.p. Fd2d	2	2 w tym 1 ODIC	2
Zn	u.k. trygonalny g.p. P31c	1	3 w tym 1 ODIC	1
Ni	u.k. trygonalny g.p. P31c	1	4 w tym 1 ODIC	2
Fe	NIEZNANA	1	2 w tym 1 ODIC	0
Mg	u.k. trójskośny g.p. $P\bar{1}$	1/(2*)	3 w tym 2 ODIC	1*
Sr	NIEZNANA	5 w tym 1 szklista	4 w tym 2 ODIC	1

Oznaczenia w tabeli: u.k. – układ krystalograficzny, g.p. – grupa przestrzenna, ODIC – faza orientacyjnie nieuporządkowana, symbolem (2\*) oznaczono drugą fazę niskotemperaturową, która może zostać zarejestrowana dopiero podczas schładzania ogrzanej uprzednio do fazy 1\* próbki.

Jak widać w Tabeli 4 badania prowadzone metodą DSC wykazały, iż wszystkie zsyntezowane układy cechuje bogactwo odmian polimorficznych. Najmniejszą liczbę faz wykryto w związku zawierającym jony  $\text{Fe}^{2+}$ , który nie wykazywał też tendencji do tworzenia odmian metastabilnych [H5].

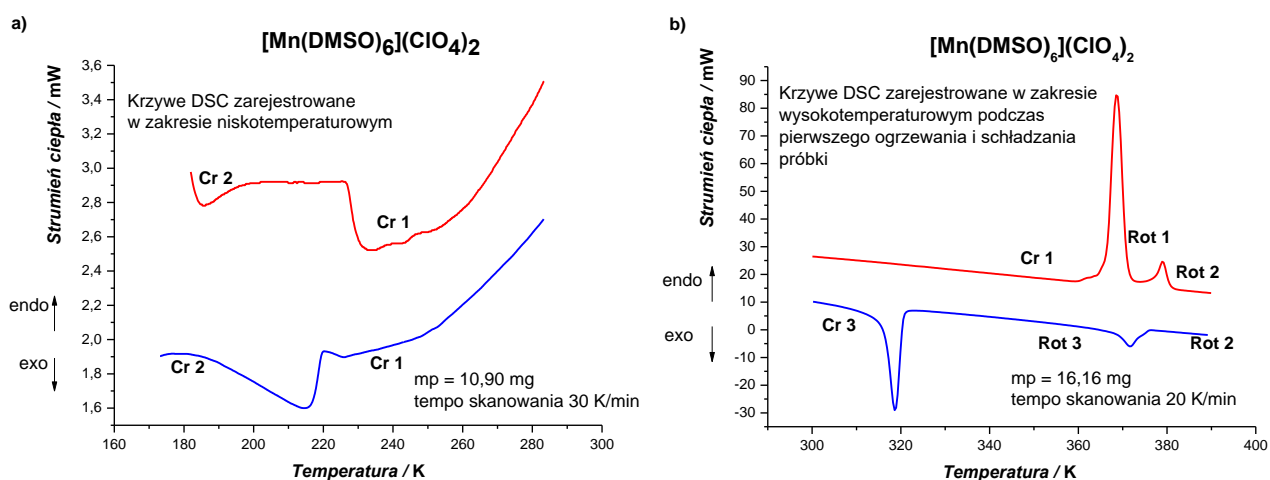
Najbardziej skomplikowaną sytuacją fazową odznaczał się związek zawierający jony  $\text{Sr}^{2+}$  [H4]. W zakresie niskotemperaturowym posiadał on największą liczbę odmian

polimorficznych i w przeciwieństwie do innych badanych połączeń wykazywał tendencję do tworzenia fazy szklistej. Równie skomplikowana, była jego sytuacja fazowa w zakresie wysokotemperaturowym. Uwzględniając fakt, że związek ten posiadał jednocześnie najwyższy zakres trwałości termicznej nietrudno sobie wyobrazić, że występujące w  $T > 300$  K fazy stanowiły ciąg blisko siebie położonych stanów, których charakterystyka była mocno utrudniona [H4].

We wszystkich zsyntezowanych związkach kompleksowych w zakresie wysokotemperaturowym ( $T > 300$  K) wykryto obecność faz ODIC o dużym stopniu dynamicznego nieporządku [H1-H9].

W zakresach niskotemperaturowych ( $T < 300$  K) związki kompleksowe zawierające jony  $Mn^{2+}$  [H6-H8],  $Cd^{2+}$  [H9] i  $Mg^{2+}$  [H3] mogły występować w postaci jednej z dwu odmian polimorficznych, przy czym w przypadku  $[Mg(DMSO)_6](ClO_4)_2$  odmiana druga miała charakter metastabilny i mogła zostać zarejestrowana dopiero po uprzednim ogrzaniu próbki do wysokich temperatur i jej późniejszym schłodzeniu.

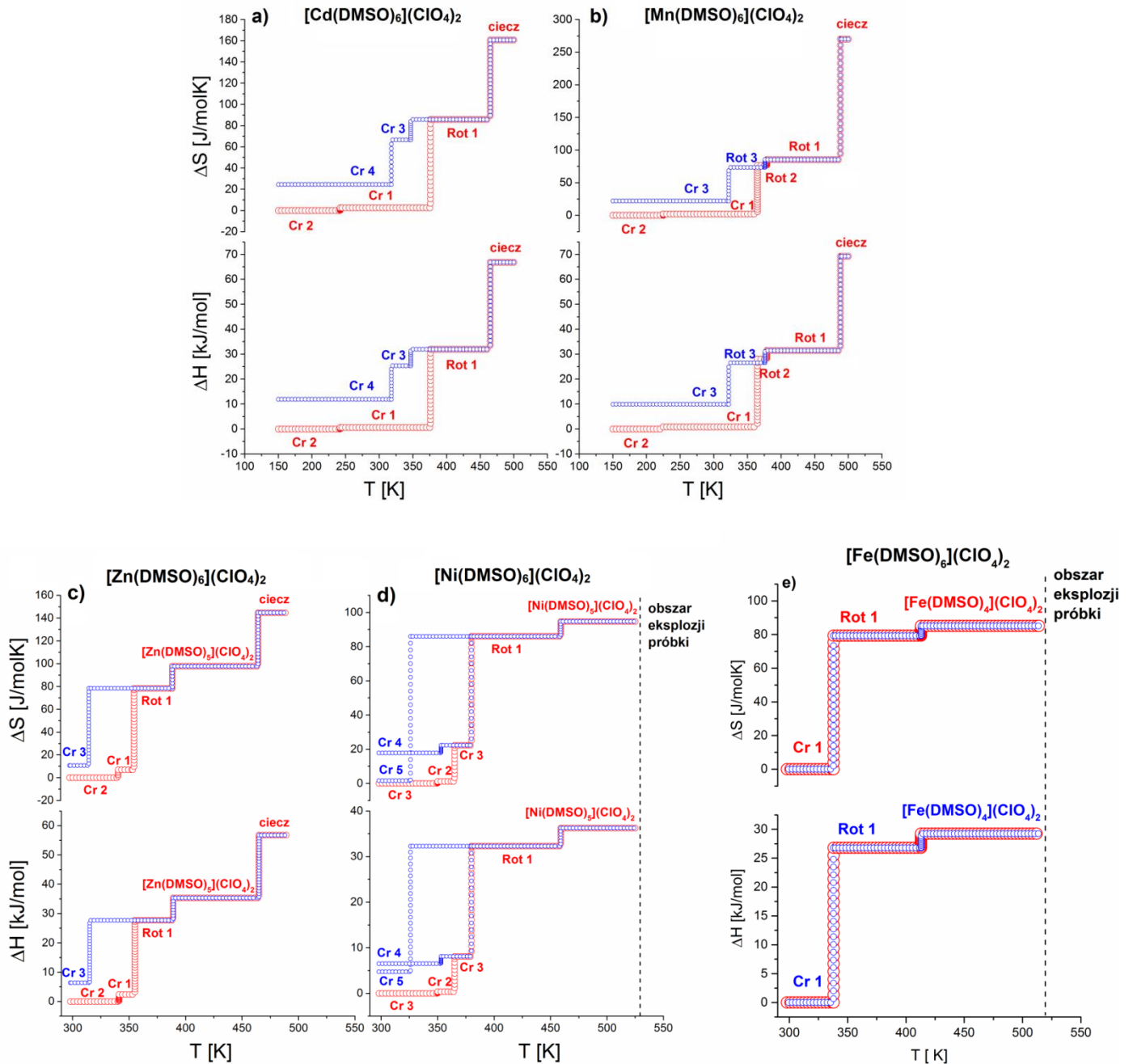
Należy podkreślić, że wszystkie z przedstawionych w Tabeli 4 faz znajdują swoje odzwierciedlenie na krzywych DSC zarejestrowanych dla poszczególnych związków. Przykładowy przebieg takich, krzywych otrzymanych dla  $[Mn(DMSO)_6](ClO_4)_2$  pokazano na Rys. 3. Zastosowane tu duże tempo skanowania próbki miało na celu rejestrację wszystkich faz obecnych w badanym związku. Pomiary kalorymetryczne dla próbki prowadzono jednak również, ze znacznie niższymi tempami, co ze względu na przejrzystość opracowania i brak istotnego wpływu na prezentowane wyniki nie zostało przedstawione w niniejszej rozprawie.



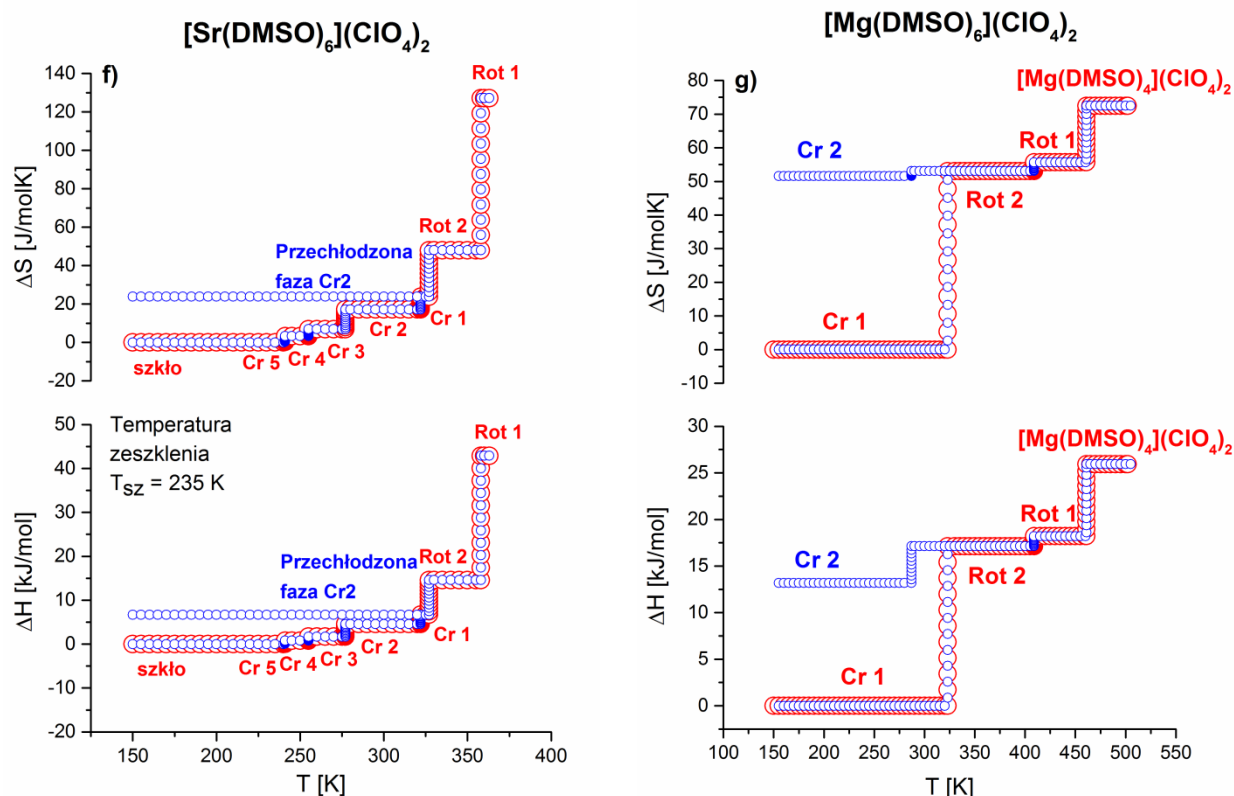
Rys. 3. Krzywe DSC zarejestrowane w zakresie a) niskotemperaturowym  $T < 300$  K b) wysokotemperaturowym  $T > 300$  K.

Aby ułatwić orientację w bardzo skomplikowanej sytuacji fazowej związków typu  $[M(DMSO)_6](ClO_4)_2$ , dla każdej z syntezowanych próbek stworzono schematyczny diagram fazowy (Rys. 4a-g). Diagram ten przedstawia rzeczywiste wartości zmian entalpii i entropii wyznaczone w danych temperaturach z pomiarów kalorymetrycznych. Na diagramie zobrazowano sekwencję i rodzaj (stabilna/metastabilna) rejestrowanych faz, co pozwala w sposób prosty określić typ przemiany (mono- lub enancjotropowa) przy przejściu z jednej fazy do drugiej. Kolorem czerwonym na rysunku oznaczono fazy zarejestrowane w procesie pierwszego ogrzewania a kolorem niebieskim pierwszego schładzania próbki. Oznaczenia literowe i liczbowe faz zostały dobrane, tak by informować czytelnika o rodzaju i liczbie faz

danego typu np.: Cr 1 – to pierwsza faza krystaliczna uporządkowana, Rot 2 – to druga faza krystaliczna nieuporządkowana (faza ODIC = faza plastyczna).



Rys. 4a-e. Diagramy fazowe kryształów jonowych o ogólnym wzorze  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , w których M = pierwiastek bloku d.



**Rys. 4f-g.** Diagramy fazowe kryształów jonowych o ogólnym wzorze  $[\text{M}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , w których M = pierwiastek bloku s.

W Tabeli 5 zebrano wartości sumaryczne zmiany entalpii zarejestrowanej dla badanych związków w przemianach zachodzących w obrębie faz stałych oraz w całym badanym metodą DSC zakresie temperaturowym obejmującym dla niektórych związków proces ich topnienia.

Jak można zauważyć w oparciu o tabelę kryształem o największych zdolnościach akumulacyjnych ciepła był  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ . Wartość sumaryczna ciepła utajonego w tym związku jest porównywalna z wartością ciepła topnienia mieszanki PnBMA/CA (poli(n-metakrylan butylu)/kwas dekanowy) stosowanej jako materiał TES w budownictwie, która wynosi 67,23 KJ/kg.<sup>23</sup>

Pozwala to wnioskować o możliwym zastosowaniu kryształów z rodziny  $[\text{M}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i ich mieszanin jako materiałów magazynujących w procesach konwersji energii.

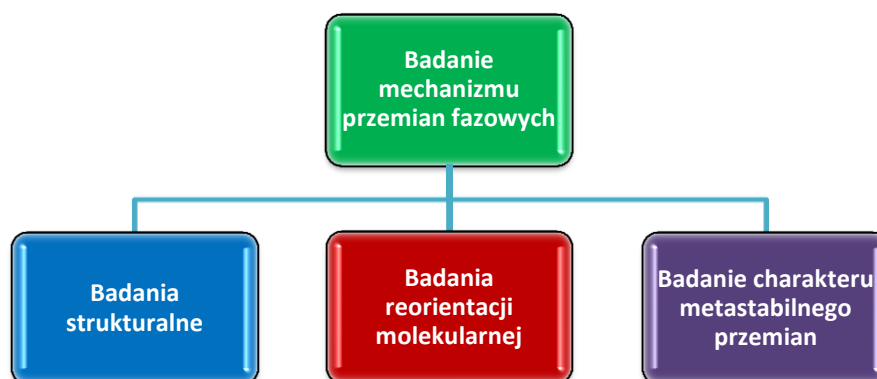
<sup>23</sup> P. Tatsidjoudoug, N. Le Pierres, L. Luo, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 18 (2013) 327–349 .

Tabela 5. Wartości zmian entalpii (ciepło utajone) badanych próbek.

	Sumaryczne ciepło utajone dla przejść zachodzących w ramach fazy stałej [kJ/mol]	Sumaryczne ciepło utajone dla wszystkich przejść zarejestrowanych w metodzie DSC [kJ/mol]	Sumaryczne ciepło utajone dla przejść zachodzących w ramach fazy stałej [kJ/kg]	Sumaryczne ciepło utajone dla wszystkich przejść zarejestrowanych w metodzie DSC [kJ/kg]
[Mn(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	31,42	69,25	43,48	95,83
[Cd(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	31,94	66,82	40,94	85,65
[Zn(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	35,33	56,75	48,19	77,41
[Ni(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	36,26	-	49,92	-
[Fe(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	29,24	-	40,41	-
[Mg(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	25,94	-	37,49	-
[Sr(DMSO) <sub>6</sub> ](ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	42,89	-	56,78	-

## 7. Badanie mechanizmu przemian fazowych [H4-H12]

Przedmiotem zainteresowania w procesie badania mechanizmu przemian fazowych, były trzy główne aspekty przedstawione poniżej w postaci schematu blokowego.

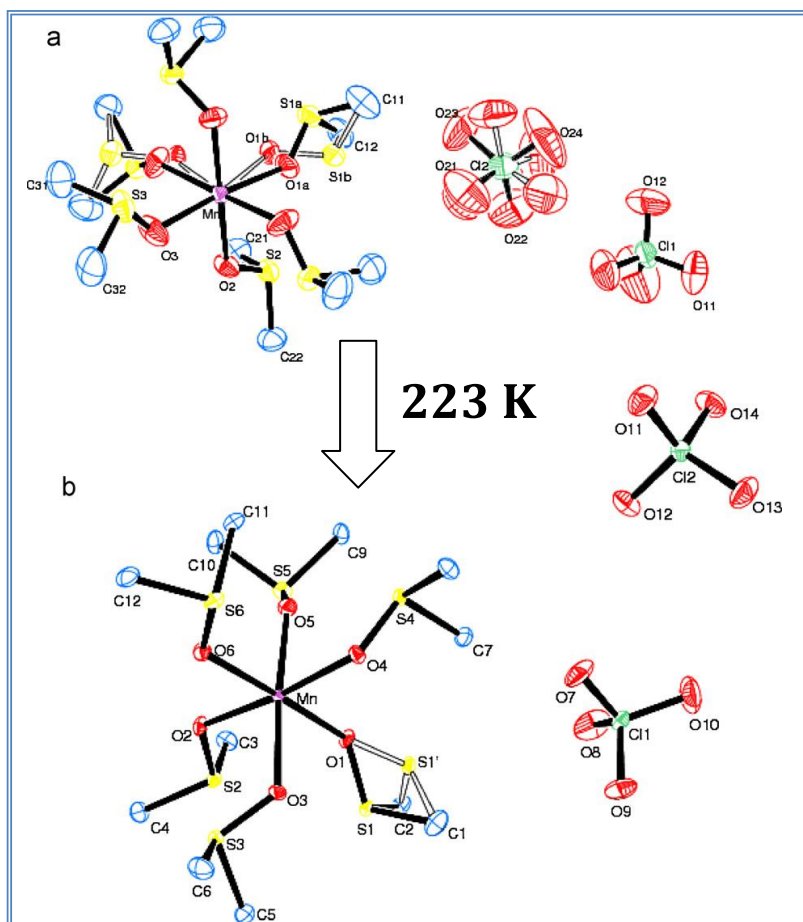




### 7.1. Badania strukturalne [H6,H8-H11]

Pomiary dyfrakcji rentgenowskiej rozpoczęto od próby wyznaczenia nieznanych na tamten czas struktur krystalicznych związków  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ ,  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i  $[\text{Sr}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ . Choć badania te, z uwagi na właściwości higroskopijne próbek, nie należały do prostych sukcesem zakończyło się określenie struktury krystalicznej fazy: wyżej- i niżej-temperaturowej występujących w związku  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  w zakresie temperatur poniżej 300 K [H6,H10]. Przeprowadzone pomiary wykazały, że  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  jest izostrukтурalny w temperaturze pokojowej z  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ . Podobnie jak on doznaje też niskotemperaturowej strukturalnej przemiany fazowej w  $T = 225$  K do układu jednoskośnego o grupie przestrzennej  $Cc$ , Nr 9.

Przeprowadzone badania krystalograficzne ujawniły też, iż w przejściu fazowym aniony chloranowe(VII) oraz ligandy DMSO ulegają porządkowaniu co zobrazowano na Rys. 5. Porządkowanie to przebiega jednakże w różny sposób. Zauważyć można, że poniżej temperatury przemiany fazowej jedna na sześciu molekuł w kationie  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6]^{2+}$  wykazuje wciąż nieporządek wokół dwu położen równowagi. Tymczasem nieporządek anionów chloranowych zanika całkowicie w temperaturze 123 K. Otrzymane metodą dyfrakcji rentgenowskiej wyniki sugerują, iż przejście fazowe zachodzące w temperaturze 223 K ma charakter zarówno strukturalny jak i dynamiczny (zmiana w przejściu fazowym dynamika reorientacyjnej ligandów DMSO i anionów  $\text{ClO}_4$ )

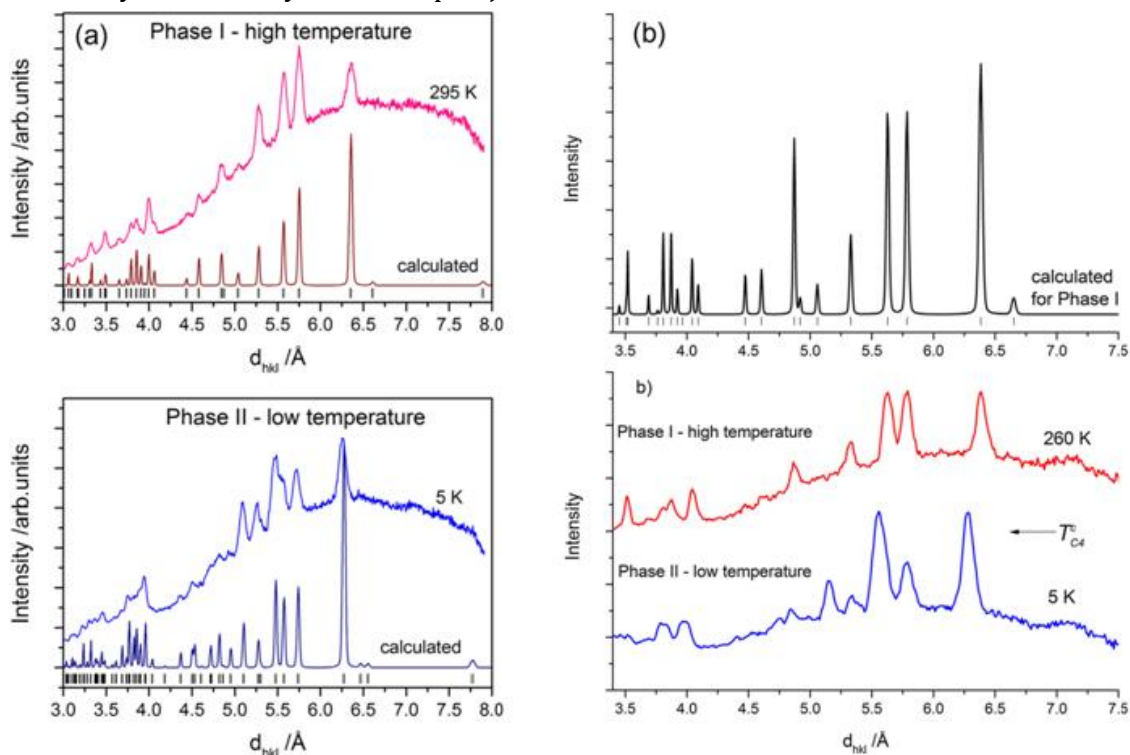


Rys. 5. Jednostka asymetryczna  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  w a) 298 K i b) 100 K wg [H6,H10].



Niskotemperaturową przemianę strukturalną występującą w związkach  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  zarejestrowano także metodą dyfrakcji neutronowej (NPD) [H8-H9].

Otrzymane w metodzie NPD neutronogramy przedstawione na Rys. 6, w pełni potwierdziły strukturalny charakter przejścia.



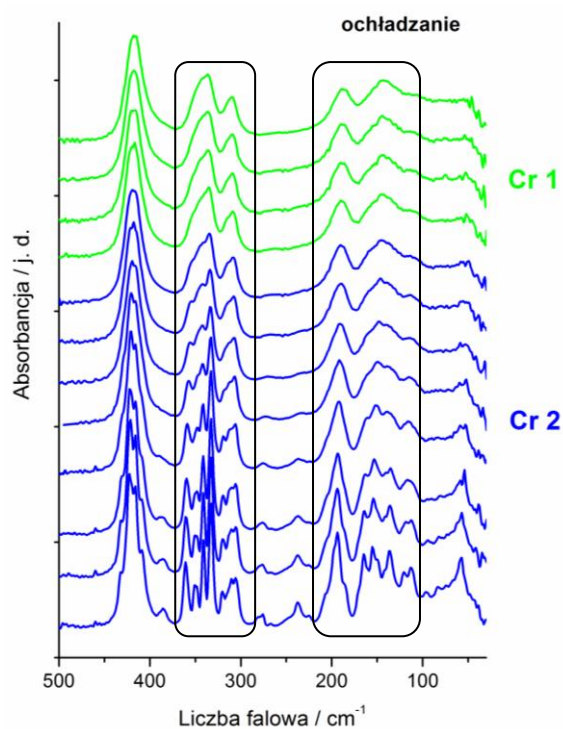
**Rys. 6.** Porównanie neutronogramów zarejestrowanych w fazach wyżej i niżej temperaturowej dla a)  $[\text{Mn}(\text{OS}(\text{CH}_3)_2)_6](\text{ClO}_4)_2$  (kąt  $2\theta = 49.21^\circ$ ) [H8] i b)  $[\text{Cd}(\text{OS}(\text{CH}_3)_2)_6](\text{ClO}_4)_2$  (kąt  $2\theta = 51.00^\circ$ ) [H9].

Strukturalne przemiany fazowe udało się zarejestrować również metodą spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni (IR) [H6,H9,H11] oraz spektroskopii ramanowskiej (RS) [H6-H7,H9]. Na rysunkach 7-9 zaprezentowano wybrane wyniki uzyskane z temperaturowych badań spektroskopowych widm IR i RS, najbardziej interesujące z punktu widzenia niniejszego opracowania. Poszczególnym kolorom przedstawionych na rysunkach pasm można przypisać dany typ fazy, oznaczonej literowo tym samym kolorem (patrz diagramy fazowe Rys. 4).

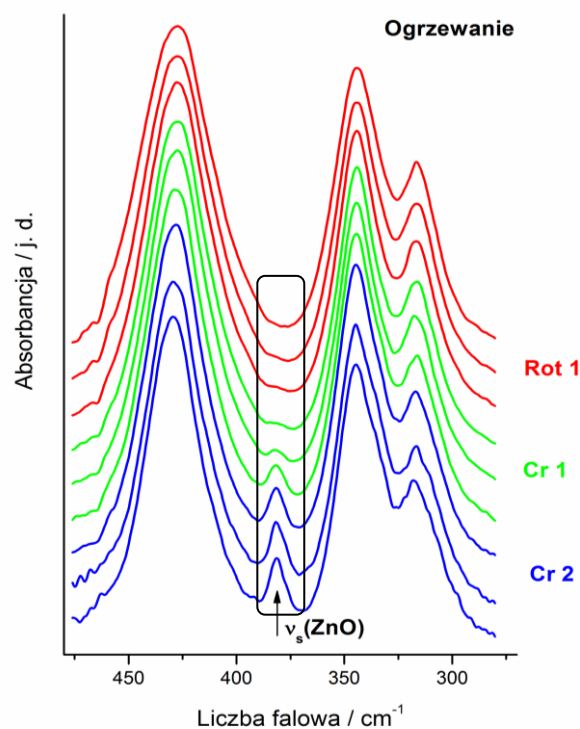
Rys. 7 przedstawia niskotemperaturową przemianę strukturalną zarejestrowaną już wcześniej metodą dyfrakcji neutronów w związku  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  (bardzo podobne wyniki uzyskano dla  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , jednakże widma tego związku nie zostały tu zaprezentowane ze względu na ich podobny charakter).

Rysunki 8-9 przedstawiają z kolei strukturalne przemiany fazowe zarejestrowane dla faz wysokotemperaturowych w zakresie temperatur wyższych od 300 K.

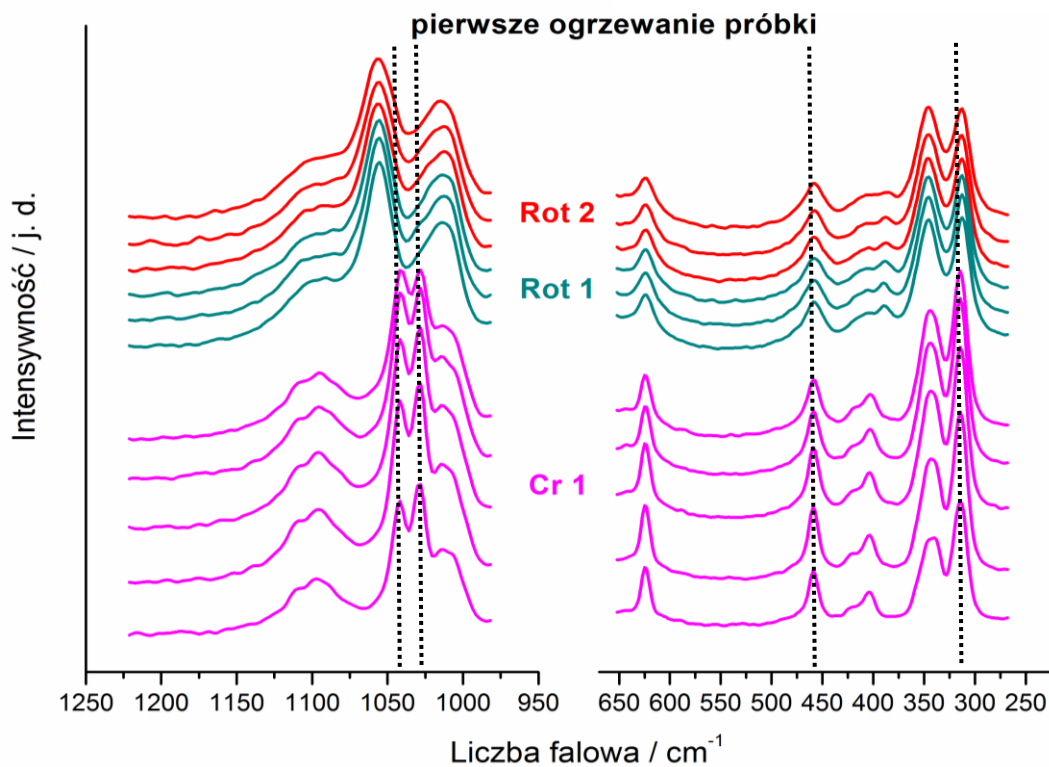
Jak widać na rysunkach 7-9 strukturalna przemiana fazowa, ze względu na zmianę symetrii układu, związana jest zazwyczaj ze zmianą liczby (patrz Rys. 7 i 9 zaznaczenie) i intensywności (patrz Rys. 7-8) poszczególnych pasm. W jej trakcie możliwe do zaobserwowania, bywa też przesunięcie niektórych pasm na widmie próbki (patrz Rys. 9).



Rys. 7. Temperaturowa ewolucja widm IR zarejestrowanych dla związku  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H9].



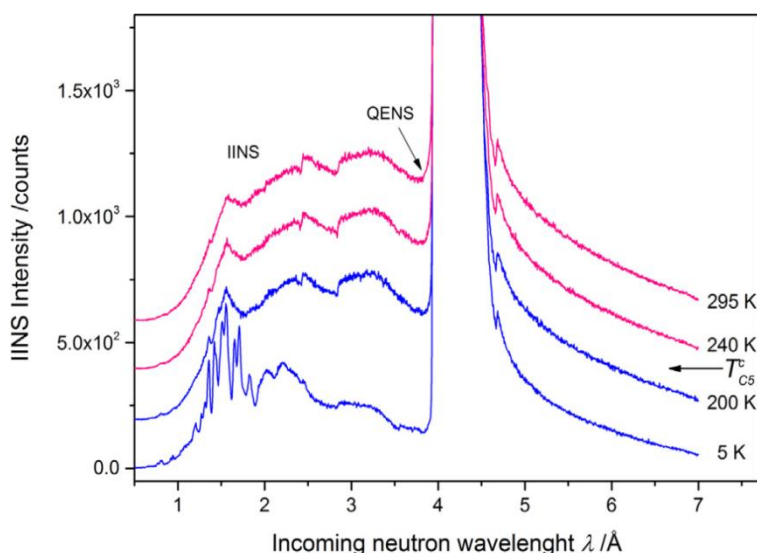
Rys. 8. Temperaturowa ewolucja widm IR zarejestrowanych dla związku  $[\text{Zn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H11].



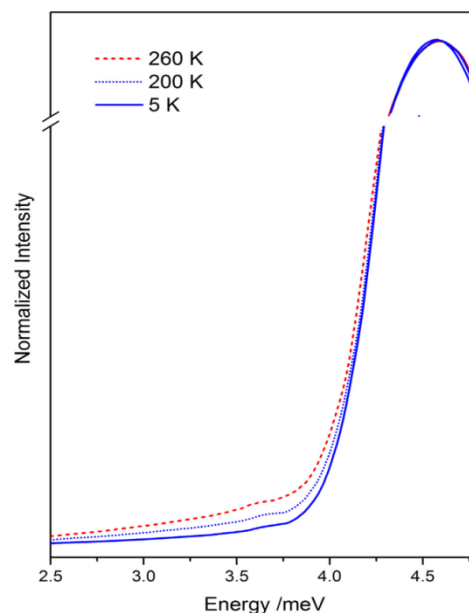
Rys. 9. Temperaturowa ewolucja widm RS zarejestrowanych dla związku  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H7].

Obserwację zmian reorientacji molekularnej prowadzono metodami: niespójnego, nieelastycznego i quasi-elastycznego rozpraszania neutronów (IINS i QENS) – badania takie wykonano dla związków  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , a ich wyniki zostały zaprezentowane w pracach [H8-H9], spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) – pomiary w tym doświadczeniu wykonano dla próbki  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i przedstawiono w pracy [H7] oraz metodami spektroskopii IR i RS, których wyniki znaleźć można w pracach [H4-H7,H9,H11-H12].

Jak wskazały zaprezentowane na Rys. 10 i 11 widma neutronowe próbek  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  przejście fazowe występujące w próbkach w zakresie niskotemperaturowym wiąże się z nieznacznym poszerzeniem piku kwazi-elastycznego, co można powiązać z uruchamianiem w przejściu fazowym szybkich ( $\tau_R \approx 10^{-12}$ - $10^{-13}$  s) rotacji molekuł  $\text{CH}_3$  wokół osi trójrotnej. Poniżej temperatury przemiany ruchy te zostają zamrożone ze względu na oddziaływania międzymolekularne typu wiązania wodorowe.



**Rys. 10.** Widma IINS/QENS zarejestrowane dla związku  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  w czterech wybranych temperaturach wg [H8].



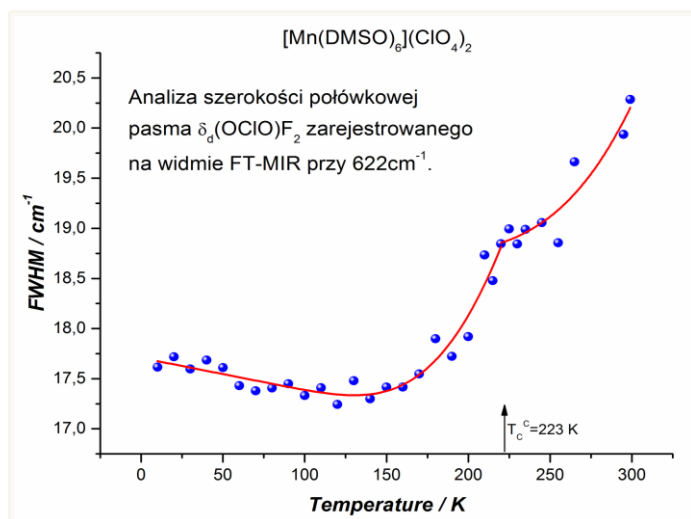
**Rys. 11.** Widma QENS zarejestrowane dla związku  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  w trzech wybranych temperaturach wg [H9].

Zmianę dynamiki reorientacyjnej ligandów, ale i zmianę dynamiki reorientacyjnej anionów chloranowych(VII) w niskotemperaturowym przejściu fazowym, sugerowały także wyniki uzyskane z pomiarów IR i RS, przeprowadzonych dla próbki  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , które przedstawiono odpowiednio na Rys. 12 i 13 [H6].

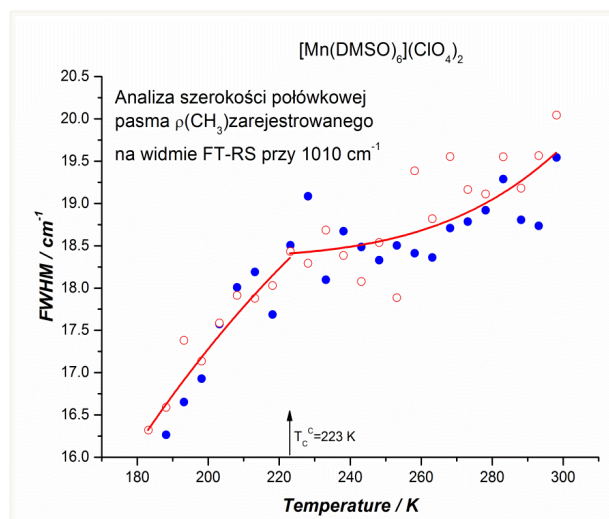
Wyznaczone w tych pomiarach w oparciu o analizę szerokości połówkowej pasma  $\delta_d(\text{OCIO})\text{F}_2$  o częstotliwości  $622 \text{ cm}^{-1}$  bariery energetyczne, jakie należy pokonać, by uruchomić reorientację anionów chloranowych(VII) wynoszą średnio:  $E_a(\text{I})=14 \text{ kJmol}^{-1}$  dla fazy wyżej temperaturowej i  $E_a(\text{II})=10 \text{ kJmol}^{-1}$  dla fazy niżej temperaturowej. Analogiczne wielkości wyznaczone dla pasma  $\rho(\text{CH}_3)$  o częstotliwości  $1010 \text{ cm}^{-1}$  wynoszą  $E_a(\text{I})=23 \text{ kJmol}^{-1}$  i  $E_a(\text{II})=2 \text{ kJmol}^{-1}$ .

Z punktu widzenia spektroskopii ramanowskiej zmiana dynamiki reorientacyjnej anionu  $\text{ClO}_4$  i ligandu DMSO w niskotemperaturowym przejściu fazowym, nie była natomiast znacząca

dla  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  [H8]. Wyniki otrzymane w oparciu o analizę położenia pasm, a w szczególności pasma  $\nu_s(\text{CH}_3)$  o częstotliwości  $2854 \text{ cm}^{-1}$  zarejestrowanego na widmach FT-MIR tego związku sugerują jednak, iż istotny wpływ na obserwowaną w nim przemianę fazową mają pojawiające się w układzie oddziaływania wodorowe [H8].



Rys. 12. Ewolucja temperaturowa pasma IR

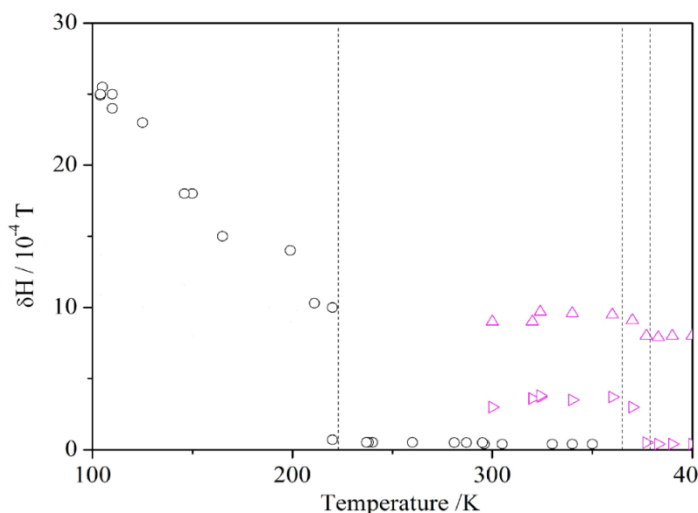


Rys. 13. Ewolucja temperaturowa pasma RS.

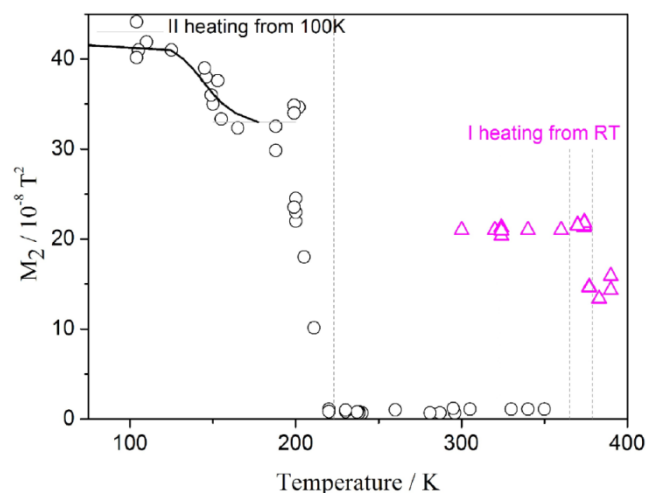
Choć zarejestrowane w pomiarach DSC wartości zmian entropii w wysokotemperaturowych przejściach fazowych, świadczą o rosnącym z temperaturą nieporządku badanych układów, oszacowana dla próbki  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wartość  $\Delta S = 74.3 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , przy przejściu z fazy krystalicznej Cr 1 do fazy rotacyjnej Rot 1, ze względu na stosunkowo dużą wartość entropii topnienia tego związku ( $\Delta S_t = 184.5 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ) nie spełniała w pełni kryterium Timmermans'a plastyczności kryształu.

Aby rozstrzygnąć czy obecne w  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  w zakresach wysokotemperaturowych fazy Rot 1, Rot 2 i Rot 3 wykazują cechy plastycznych kryształów koniecznym było, więc zbadanie zmian reorientacji molekularnej w tym związku z zastosowaniem spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego [H7]. W metodzie tej analizie poddano temperaturową zależność szerokości nachyleniowej i drugiego momentu linii  $^1\text{H}$ NMR (Rys. 14 i Rys. 15). Pomiar prowadzono w trybie ogrzewania, szybkiego schłodzenia i ponownego ogrzewania próbki, przy czym ze względu na ograniczenia zastosowanej aparatury, wyniki rejestrowano jedynie dla procesów ogrzewania. Jak wskazuje przedstawiona na Rys. 14 zależność temperaturowa szerokości nachyleniowej linii NMR, na widmach próbki wykonanych w trakcie jej pierwszego ogrzewania (różowe trójkąty) wyraźnie widoczne są dwie składowe linie o stosunku powierzchni 1 : 3 co świadczy o tym, iż protony w układzie wykonują dwa różne rodzaje ruchów. Szybkie schłodzenie próbki powoduje zanik jednej ze składowych linii i zmianę wartości drugiej. Podczas ponownego ogrzewania próbki na wykresie rejestrowana jest już tylko jedna składowa linii nawet w zakresach wysokotemperaturowych (czarne koła). Otrzymana zależność drugiego momentu kształtu linii NMR, którą przedstawia Rys. 15 pozwala wnioskować o dynamice molekularnej protonów w poszczególnych fazach, co w sposób schematyczny przedstawia Rys. 16, na którym zieloną gwiazdką oznaczono rotujące w poszczególnych fazach atomy.



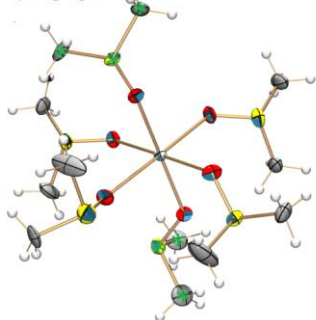


Rys. 14. Zależność temperaturowa szerokości nachyleniowej linii NMR ( $\delta H$ ).

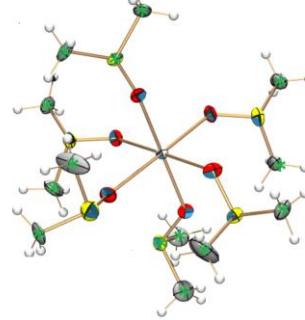


Rys. 15. Zależność temperaturowa drugiego momentu ( $M_2$ ) kształtu linii NMR.

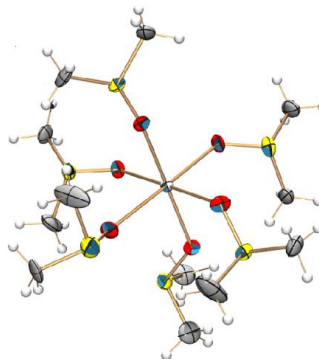
**faza Cr 1**  
 anizotropowa reorientacja 2 z 6 molekuł DMSO,  
 rotacja 4 grup  $\text{CH}_3$



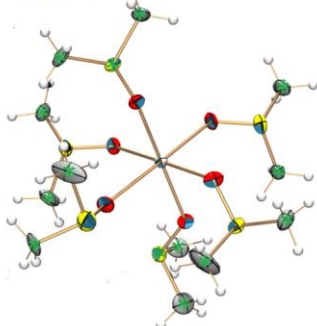
**faza Rot 2**  
 anizotropowa reorientacja 2 z 6 molekuł DMSO,  
 rotacja 12 grup  $\text{CH}_3$



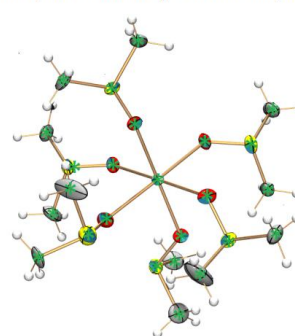
**zamrożona faza Rot 3**



**faza Rot 1**  
 izotropowa rotacja 2 z 6 molekuł DMSO, rotacja  
 12 grup  $\text{CH}_3$



**faza Rot 3**  
 izotropowa reorientacja kationu kompleksowego

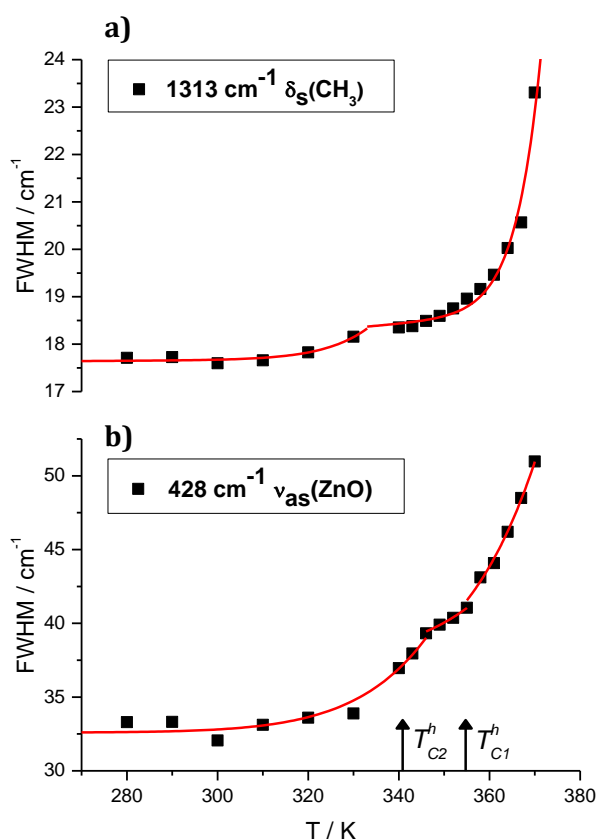


Rys. 16. Charakterystyka dynamiki poszczególnych faz wg [H7].

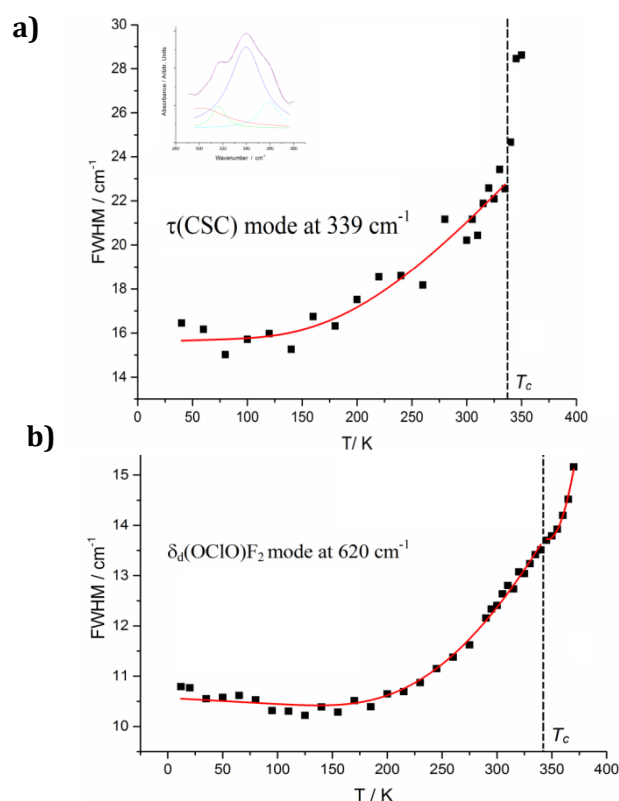
Jak nietrudno zauważyć nieporządek reorientacyjny faz wysokotemperaturowych kryształu  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  jest bardzo wysoki. Wydaje się więc zasadnym, określenie tych faz mianem plastycznych kryształów. Odnotowano również, iż proces szybkiego schładzania próbki prowadzi do całkowitego zamrożenia ruchów reorientacyjnych w fazie metastabilnej Rot 3. Ponowne uruchomienie rotacji molekuł w procesie ogrzewania tak schłodzonej fazy

przebiega z uprzednim uruchomieniem rotacji czterech grup metylowych należących do dwu molekuł DMSO leżących na osi czterokrotnej kationu kompleksowego. Oszacowana wartość energii aktywacji jaką należy dostarczyć do układu by zapoczątkować wspomniany wyżej proces wynosi  $E_a = 12 \text{ kJmol}^{-1}$ .

Do prześledzenia zmian dynamiki reorientacyjnej molekuł w trakcie przemiany fazowej zachodzącej do fazy plastycznej stosowano też technikę spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni [H4-H5,H7,H11-H12]. Na Rys. 17 i 18 zaprezentowano przykładowe przebiegi zależności szerokości połówkowej wybranych pasm w trakcie przemiany fazowej zachodzącej do fazy plastycznej (oznaczanej na diagramach fazowych skrótem Rot). Na podstawie przebiegu krzywych obrazujących jakim zmianom ze wzrostem temperatury ulegają szerokości pasm:  $\delta_s(\text{CH}_3)$ ,  $\nu_{\text{as}}(\text{ZnO})$ ,  $\tau(\text{CSC})$  i  $\delta_d(\text{OCIO})\text{F}_2$ , można wywnioskować, iż zmiana dynamiki anionów  $\text{ClO}_4$  i ligandów DMSO ma istotny wpływ na mechanizmu przemiany fazowej kryształ uporządkowany-kryształ platyczny.



**Rys. 17.** Zależność temperaturowa szerokości połówkowej wybranego pasma a) FIR i b) MIR związku  $[\text{Zn}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H11].



**Rys. 18.** Zależność temperaturowa szerokości połówkowej wybranego pasma a) FIR i b) MIR związku  $[\text{Fe}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H5].

### 7.3. Badania charakteru metastabilnego przemian [H12]

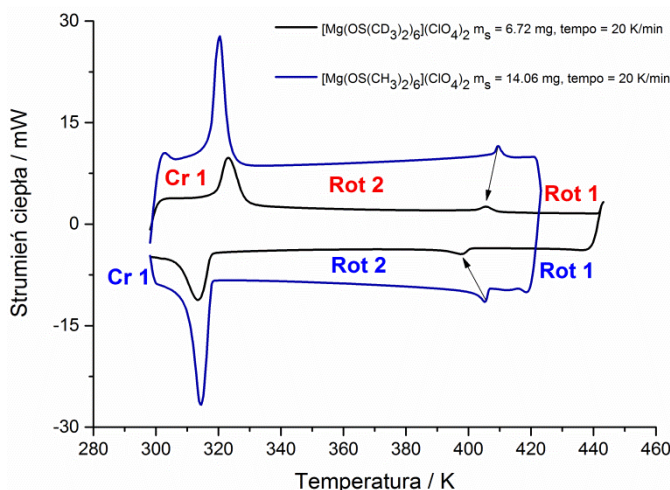
Do zbadania charakteru metastabilnego przemian wybrano związek  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , cechujący się najbardziej przejrzystą sytuacją fazową i posiadający najmniejszą liczbę możliwych odmian metastabilnych. Wybrany związek koordynacyjny poddano deuteracji. Zdeuterowany analog przebadano ponownie techniką DSC, a następnie przeprowadzono analizę dynamiki molekularnej obu kompleksów metodą spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni [H12].

Wprowadzenie do strefy koordynacyjnej zdeuterowanego ligandu pozwoliło zaobserwować przesunięcie w kierunku wyższych temperatur anomalii związanej z przejściem fazowym Rot 2 do Rot 1 (Rys. 19). Fakt ten sugeruje, iż wspomniana przemiana, wiąże się ze zmianą dynamiki reorientacyjnej molekuł  $\text{CH}_3$ . Deuteracja ligandu spowodowała także zanik metastabilnego przejścia fazowego Rot 2 – Cr 2 (Rys. 20ab) . Wynik ten sugeruje, iż przemiana ta mogła być więc powiązana z obecnością w próbce oddziaływań między molekularnych typu wiązania wodorowe. Oddziaływania te zanikały po zastąpieniu wodoru jego cięższym izotopem, dlatego przejście fazowe nie było już rejestrowane.

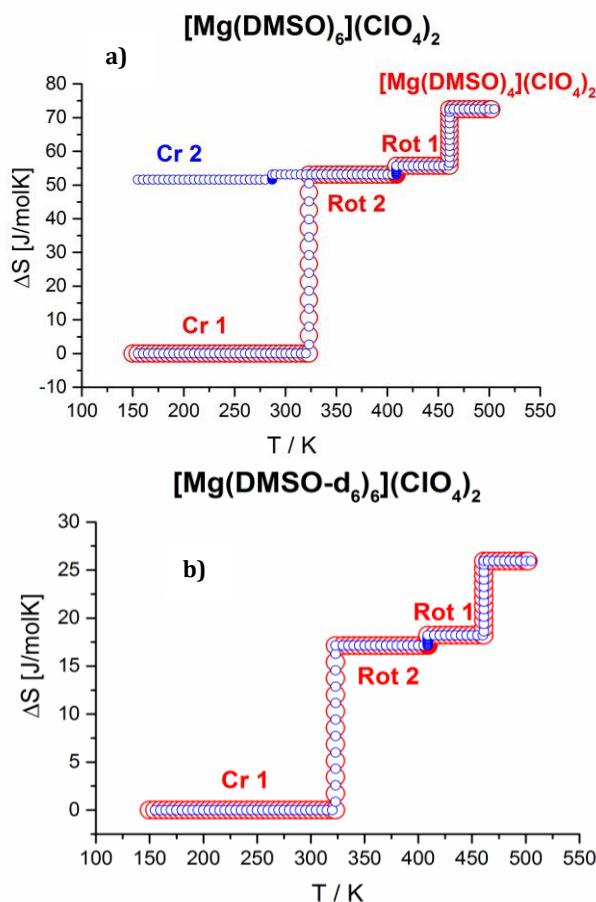
Pomiary IR prowadzone dla próbek  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i jej zdeuterowanego analogu wykazały dodatkowo, iż w przejściu fazowym Cr 1 – Rot 2 zmianie ulega symetria kryształu.

Wniosek taki oparto m.in. na obserwacji ewolucji temperaturowej pasma  $\nu_{\text{as}}(\text{CD}_3)$ , zarejestrowanego na widmie FT-MIR próbki  $[\text{Mg}(\text{DMSO-d}_6)_6](\text{ClO}_4)_2$ , przy ok.  $2259 \text{ cm}^{-1}$  (Rys. 21). Jak widać na rysunku 21 pasmo to jest pasmem pojedynczym w fazie Rot 2 i ulega wyraźnemu rozszczepieniu przy przejściu do fazy Cr 1.

Aby zbadać czy fazy wysokotemperaturowe charakteryzuje nieporządek reorientacyjny, pasma FT-MIR próbki



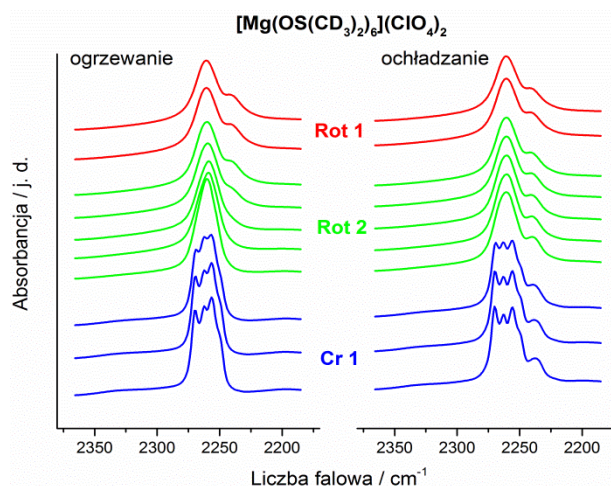
Rys. 19. Krzywe DSC zarejestrowane dla  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  i jego zdeuterowanego analogu wg [H12].



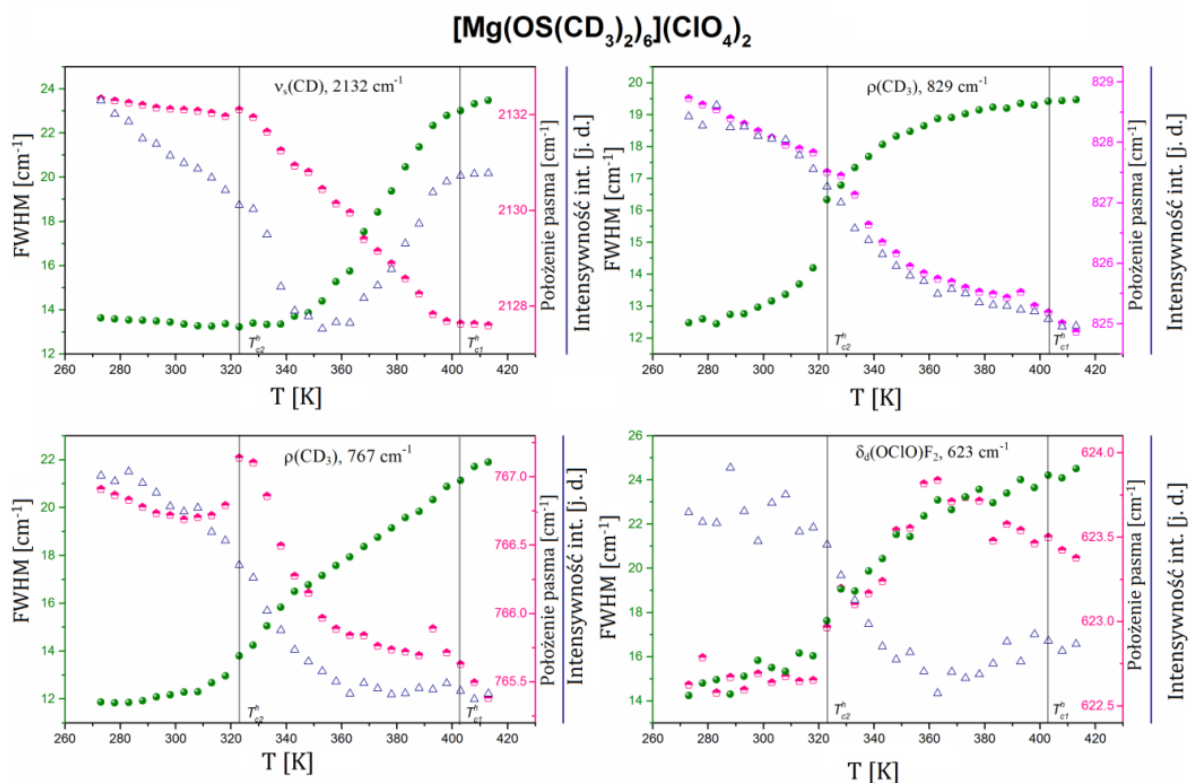
Rys. 20. Diagram fazowy a)  $[\text{Mg}(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$  b)  $[\text{Mg}(\text{DMSO-d}_6)_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H12].

$[\text{Mg}(\text{DMSO-d}_6)_6](\text{ClO}_4)_2$  poddano obróbce matematycznej, która ujawniła jak zmienia się intensywność, położenie i szerokość wybranych pasm w funkcji temperatury układu.

Otrzymane zależności (Rys. 22) pozwoliły wnioskować o wyraźnej zmianie dynamiki reorientacyjnej ligandów DMSO i anionów  $\text{ClO}_4$  w przejściach fazowych Cr 1 – Rot 1 – Rot 2.



Rys. 21. Widmo FT-MIR w zakresie temperaturowym rejestracji przemian fazowych Cr-1 – Rot 2- Rot 1 wg [H12].



Rys. 22. Zależność temperaturowa parametrów charakteryzujących wybrane pasma FT-MIR próbki  $[\text{Mg}(\text{DMSO-d}_6)_6](\text{ClO}_4)_2$  wg [H12].



## B.4. Podsumowanie – najważniejsze osiągnięcia i elementy nowości naukowej

Do najważniejszych osiągnięć w ramach przeprowadzonych badań i charakterystyki przemian fazowych obecnych w kryształach jonowych z fazą plastyczną można zaliczyć:

1. Określenie zakresu temperaturowego trwałości zsyntezowanych związków kompleksowych.
2. Rozwikłanie sytuacji fazowej wszystkich badanych układów.
3. Przypisanie każdej z wykrytych faz odpowiednio charakteru stabilnego lub meta-stabilnego.
4. Wyznaczenie parametrów termodynamicznych wykrytych przejść fazowych, które pozwoliły oszacować całkowitą zmianę entropii i entalpii badanych układów. Ta część pomiarów była bardzo istotna do oceny właściwości akumulacyjnych badanych połączeń i możliwości ich potencjalnego zastosowania jako materiałów typu TES.
5. Przeprowadzenie w oparciu o wyznaczone wartości  $\Delta S$  podziału wykrytych faz na fazy krystaliczne i plastyczno-krystaliczne.
6. Rozszyfrowanie powiązań wykrytych przejść fazowych ze zmianą dynamiki molekularnej anionów chloranowych(VII) i ligandów DMSO (ze szczególnym uwzględnieniem zmian dynamiki układu z jakimi mamy do czynienia w przejściach fazowych: kryształ uporządkowany – kryształ plastyczny) oraz ze zmianą struktury krystalicznej związków.

## Część C: Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

### C.1. Działalność naukowa przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

Odnosiniki do prac habilitanta, wymienione w podrozdziałach C.1 i C.2, zostały wykazane w podrozdziale C.3 niniejszego opracowania.

Moja fascynacja chemią jako dziedziną nauki zrodziła się już w siódmej klasie szkoły podstawowej nr 2 w Wieliczce, gdzie pod czujnym okiem ukochanej nauczycielki mgr Jadwigi Weinheimer zgłębiałam, jak mi się wtedy wydawało, trudne zagadnienia związane z budową cząsteczek i ich właściwościami.

Zainteresowanie przedmiotem, potwierdziłam obierając chemię jako jeden z przedmiotów egzaminacyjnych podczas obowiązującego jeszcze wtedy egzaminu do szkoły średniej. Nauka w liceum im. Jana Matejki w Wieliczce to zarówno czas moich pierwszych samodzielnych eksperymentów chemicznych, jak i czas krystalizacji realizowanych później celów zawodowych. Współpracę z dyrekcją szkoły kontynuuję do chwili obecnej nie odrzucając wystosowanych przez szkołę zaproszeń do prowadzenia w niej pokazów chemicznych podczas organizowanego co roku Festiwalu "Matejkowskie Dni Nauki i Pasji".

Wybór studiów chemicznych na Uniwersytecie Jagiellońskim był naturalną konsekwencją obranej przeze mnie ścieżki naukowej, której pierwszym etapem była obrona pracy magisterskiej z zakresu elektrochemii.

Pracę badawczą kontynuowałam w Zakładzie Fizyki Chemicznej zgłębiając, w ramach podjętej pod kierunkiem prof. dr hab. Anny Migdał-Mikuli pracy doktorskiej, zagadnienia związane z badaniem przemian fazowych w ciele stałym [P1-P3]. Rezultatem tych badań, było określenie polimorfizmu czterech zsyntetyzowanych przeze mnie związków kompleksowych typu  $[M(\text{DMSO})_6](\text{ClO}_4)_2$ , których właściwości termodynamiczne i plastyczne okazały się na tyle interesujące, by zdecydować o kontynuacji w ramach dalszej pracy naukowej badań fizykochemicznych nad całą rodziną związków o zadanym wzorze chemicznym.

### C.2. Działalność naukowa po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

W 2005 roku zostałam zatrudniona w Zakładzie Dydaktyki Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, którego kierownictwo powierzono prof. Annie Migdał-Mikuli. Jednocześnie jako członek Zespołu Badań Przemian Fazowych kontynuowałam współpracę z Zakładem Fizyki Chemicznej, której owocem jest prezentowana rozprawa habilitacyjna.

Od chwili podjęcia przeze mnie pracy na uczelni moje zainteresowania naukowe poszerzyłam o aspekt związany z szeroko pojętą dydaktyką chemii, obejmującą zarówno nauczanie akademickie jak i szkolenia obecnych i przyszłych nauczycieli. Pozwoliło mi to połączyć mój rozwój naukowo-badawczy z rozwojem kompetencji wykładowcy. Aby zapoznać

się ze specyfiką pracy szkoły w roku 2012 jako nauczyciel chemii podjęłam pracę w niepełnym wymiarze godzin w LO im. Świętej Rodziny z Nazaretu w Krakowie. Podjęta przeze mnie zaraz po tym inicjatywa umożliwiła nawiązanie współpracy patronackiej Wydziału Chemii z dyrekcją szkoły, która zapewniła z kolei studentom Naszego Wydziału możliwość odbywania praktyk i szkoleń na terenie w/w placówki. Jednocześnie jako opiekun patronatu ze strony uczelni zobowiązałam się do prowadzenia autorskich zajęć doświadczalnych, cieszących się dużym zainteresowaniem ze strony młodzieży szkolnej. Kompetencje dydaktyczne rozwijałam prowadząc szkolenia wszystkich grup docelowych począwszy od dzieci, poprzez młodzież szkolną, studentów, aż do nauczycieli. Doświadczenia zdobyte, na tym polu zostały przeze mnie opublikowane zarówno w polsko jak i anglojęzycznych czasopismach edukacyjnych [K3-K5, P14-P20]. Aktywnie uczestniczę też w corocznej organizacji sesji naukowych dla nauczycieli oraz Wojewódzkiego Konkursu Wiedzy Chemicznej. Zdobytą przeze mnie wiedzę ekspercką wykorzystuję działając w licznych komisjach oceniających w tym: komisji oceniającej uczestników olimpiady chemicznej i wojewódzkiego konkursu chemicznego, komisji oceniającej uczestników matury próbnej organizowanej we współpracy z Wydziałem Chemii UJ, czy też komisji stypendialnej działającej w ramach projektu „Doctus – Małopolski fundusz stypendialny dla doktorantów”.

Choć praca dydaktyczna odgrywa istotną rolę w obranej przeze mnie ścieżce zawodowej, największą z moich pasji pozostaje wciąż praca chemika eksperymentalnego, której staram się poświęcać każdą wolną od zajęć dydaktycznych chwilę. W swojej pracy naukowo-badawczej koncentruję się na zagadnieniach związanych z fenomenem polimorfizmu ciał stałych. Od momentu podjęcia przeze mnie pracy w charakterze adiunkta staram się poprzez staże zdobywać praktyczną wiedzę na temat technik spektroskopowych, mogących znaleźć zastosowanie w badaniach zmian reorientacji molekularnej. Zdobytą wiedzę wykorzystuję w procesie opracowywania projektowanych przeze mnie eksperymentów badawczych. Swoich zainteresowań nie zamykam jednak jedynie do wyżej wymienionego obszaru. Równie ważnym aspektem jest dla mnie współpraca z przemysłem oparta o transfer wiedzy i technologii, którą staram się rozwijać. Bazując na zdobytej przeze mnie wiedzy specjalistycznej w swojej przyszłej pracy naukowej chciałabym się skoncentrować na badaniach ferroelektrycznych kryształów plastycznych mogących znaleźć zastosowanie w elementach pamięci masowej.

### C. 3. Dorobek publikacyjny wraz z analizą bibliometryczną

#### 1. Dane bibliometryczne

➤ Liczba publikacji w bazie Journal Citation Reports:	25
➤ Liczba publikacji w bazie Journal Citation Reports po uzyskaniu stopnia doktora:	22
➤ Liczba publikacji poza bazą Journal Citation Reports po uzyskaniu stopnia doktora:	8
➤ Liczba rozdziałów w książkach	5
➤ <b>Sumaryczny IF wg roku wydania dla publikacji z bazy JCR:</b>	<b>36.386</b>
➤ Sumaryczny 5-cio letni IF dla publikacji z bazy JCR:	38.299
➤ Suma punktów MNiSW (lista A)	570
➤ <b>Średni IF wg roku wydania dla publikacji z bazy JCR:</b>	<b>1.516</b>
➤ Średni 5-cio letni IF dla publikacji z bazy JCR:	1.586
➤ Średnia liczba punktów MNiSW	24
➤ Cytowania (20.03.2016, wg bazy Web of Science)	
➤ Całkowita liczba cytowań:	158
➤ Liczba cytowań bez samocytowań:	40
➤ Indeks Hirscha	H = 8
➤ <b>Średni deklarowany udział Habilitanta</b>	<b>52%</b>

2. Publikacje poza cyklem wymienionym w punkcie B.2 opublikowane w czasopismach znajdujących się w bazie JCR

\* – oznaczenie autora do korespondencji

IF – podano wg JCR zgodnie z rokiem opublikowania (podano aktualny IF średni pięcioletni)

cyt. = liczba cytowań wg Web of Science z dnia 20.05.2017

Publikacje przed uzyskaniem stopnia doktora

Lp.	Publikacje	IF wg bazy JCR		PKT MNiSW (lista A)	Liczba cytowań	Udział w pracy / %
		z roku wydania	5-cio letni			
P1	Anna Migdał-Mikuli*, Edward Mikuli, <b>Elżbieta Szostak</b> , Joanna Serwońska <i>Phase polymorphism of [Cd(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Z. Naturforsch. A., 58a (2003) 341 - 345.</b> Udział własny 40%: zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	0.681	0.747	20	19	40
P2	Anna Migdał-Mikuli*, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase polymorphism of [Co(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Thermochim. Acta, 426 (2005) 191 - 198.</b> Udział własny 55%: koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	1.230	2.341	30	15	55

P3	Anna Migdał-Mikuli*, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase polymorphism of [Mn(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Z. Naturforsch. A., 60a (2005) 289 - 295.</b> Udział własny 50%: koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	1.007	0.747	20	20	50

#### Publikacje po uzyskaniu stopnia doktora

Lp.	Publikacje	IF wg bazy JCR		PKT MNiSW (lista A)	Liczba cytowań	Udział w pracy / %
		z roku wydania	5-cio letni			
P4	Anna Migdał-Mikuli*, Łukasz Skoczylas, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase polymorphism of [Co(DMSO)<sub>6</sub>](BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Z. Naturforsch. A., 61a (2006) 180 - 188.</b> Udział własny 40%: zaplanowanie pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	0.904	0.747	20	7	40
P5	Edward Mikuli*, <b>Elżbieta Szostak</b> , Bartłomiej Grad <i>Phase transitions in [Mg(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>Phase Trans., 80 (2007) 539 - 546.</b> Udział własny 20%: synteza próbki, wykonanie części pomiarów DSC, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	0.865	0.854	20	2	20

P6	Anna Migdał-Mikuli*, Natalia Górską, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase transition and thermal decomposition of <math>[Al(DMSO)_6]Cl_3</math></i> <b>J. Thermal Anal. Calorim. (2006) 1 - 6.</b> Udział własny 35%: udział w syntezie próbki i interpretacji wyników otrzymanych z pomiarów termograwimetrycznych.	1.438	1.617	25	5	35
P7	Anna Migdał-Mikuli*, Łukasz Skoczylas, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Phase polymorphism of <math>[Ni(DMSO)_6](BF_4)_2</math> studied by differential scanning calorimetry</i> <b>J. Coord. Chem., 61 (2008) 2197 - 2206.</b> Udział własny 35%: wykonanie części pomiarów DSC, pomoc w interpretacji wyników, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.	0.732	1.341	25	5	35
P8	Anna Migdał-Mikuli, <b>Elżbieta Szostak*</b> , Kacper Drużbicki, Diana Dołęga <i>Polymorphism and thermal decomposition of <math>[Ni(DMSO)_4]I_2</math></i> <b>J. Therm. Anal. Cal., 93 (2008) 853-856.</b> Udział własny 70%: koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC i TG wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.	1.630	1.617	25	3	70

P9	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Agnieszka Kaczor  <i>Phase Polymorphism of [Mn(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> Studied by Raman Spectroscopy</i>  <b>AIP Conf. Proc. 1267 (2010) 584-585.</b>                      Udział własny 90%: koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu i zakresu trwałości zaplanowanie wszystkich pomiarów RS wraz z ich interpretacją, napisanie artykułu.</p>	-	-	-	-	90
P10	<p><b>Elżbieta Szostak</b>, Kacper Drużbicki*, Edward Mikuli  <i>Molecular structure and vibrational spectrum of [Mg((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>SO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by infrared and Raman spectroscopies and DFT computations</i>  <b>J. Mol. Struct. 970 (2010) 139-146.</b>                      Udział własny 48%: koncepcja badań, synteza próbki, analiza jej składu, wykonanie widm FIR, MIR RS wraz z pełną analizą widm, napisanie części publikacji wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.</p>	1.599	1.683	20	14	48
P11	<p>Natalia Górská*, Akira Inaba, <b>Elżbieta Szostak</b>, Edward Mikuli  <i>Phase transitions and reorientational motions in [Al(OS(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>6</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> and its deuterated analog</i>  <b>Thermochim. Acta, 533 (2012) 66-73.</b>                      Udział własny 30%: zaplanowanie, wykonanie i opracowanie widm FT-FIR, FT-MIR i FT-RS.</p>	1.989	2.341	30	4	30



<p><b>P12</b></p>	<p>Natalia Górską*, <b>Elżbieta Szostak</b>, Kacper Drużbicki, Edward Mikuli, Akira Inaba, Yasukazu Hirao  <i>A comprehensive study on crystal structure, thermal behavior, and molecular dynamics of [Sr(DMSO)<sub>4</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]</i>  <b>J. Coord. Chem. 67 (19) (2014) 3135-3154.</b>                      Udział własny 20%: zaplanowanie, wykonanie i opracowanie pomiarów temperaturowych widm FT-FIR, FT-MIR.</p>	<p><b>2.012</b></p>	<p><b>1.341</b></p>	<p><b>25</b></p>	<p><b>3</b></p>	<p><b>20</b></p>
<p><b>P13</b></p>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli, Paweł Bernard  <i>Low-temperature phase transitions in [Cd(DMSO)<sub>6</sub>](BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry, X-ray single crystal diffraction and infrared absorption spectroscopy</i>  <b>J. Mol. Struct. 1092 (2015) 81-88.</b>                      Udział własny 70%: koncepcja badań, analiza składu próbki i jej zakresu trwałości zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC i IR wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>	<p><b>1.780</b></p>	<p><b>1.683</b></p>	<p><b>20</b></p>	<p><b>2</b></p>	<p><b>70</b></p>

### 3. Książki i monografie

#### Wydane przed uzyskaniem stopnia doktora

K1	<p><b>Elżbieta Szostak</b>, Anna Migdał-Mikuli <i>Badanie przejść fazowych w związku kompleksowym <math>[Zn(DMSO)_6](ClO_4)_2</math> metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej</i></p> <p><b>Rozdział w książce:</b> Na pograniczu chemii i biologii, Wydawnictwo Naukowe UAM w Poznaniu, Tom XI (2004) 141- 148. <b>ISBN 83-232-1494-8</b></p> <p>Udział własny 70%: koncepcja badań, synteza próbki, zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu.</p>
----	--

#### Wydane po uzyskaniu stopnia doktora

K2	<p>Anna Migdał-Mikuli, Paweł Bernard, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>Badanie przejść fazowych w związku kompleksowym <math>[Sr(DMSO)_6](ClO_4)_2</math> metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej</i></p> <p><b>Rozdział w książce:</b> Na pograniczu chemii i biologii, Wyd. Naukowe UAM w Poznaniu, Tom XXI (2008)143- 151. <b>ISBN 83-232-1968-2</b></p> <p>Udział własny 70%: koncepcja badań, synteza próbki, zaplanowanie i wykonanie wszystkich pomiarów DSC wraz z ich interpretacją, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu.</p>
K3	<p>Paweł Bernard, Anna Białas, Paweł Broś, Tony Ellermeijer, Ewa Kędzierska, Małgorzata Krzeczowska, Iwona Maciejowska, Ewa Odrowąż, <b>Elżbieta Szostak</b>, Konsorcjum ESTABLISH <i>Podstawy metodologii IBSE</i></p> <p><b>Książka:</b> Nauczanie przedmiotów przyrodniczych kształtujące postawy i umiejętności badawcze uczniów, Wydział Chemii UJ, Kraków (2012) 9-17. <b>ISBN 978-83-921505-9-6</b></p> <p>Udział własny 10%: zaprojektowanie i przeprowadzenie części badań laboratoryjnych stanowiących przedmiot treści zawartych w książce.</p>

<b>K4</b>	<p>Paweł Bernard, Anna Białas, Paweł Broś, Małgorzata Krzeczowska, Iwona Maciejowska, Ewa Odrowąż, <b>Elżbieta Szostak</b> <i>ESTABLISH – Innovations in Teacher Training in Poland</i> <b>Rozdział w książce: Science. Society. Didactics, Uniwersytet Pedagogiczny, Kraków (2013) 35 – 49.</b> <b>ISBN9788372718082</b></p> <p>Udział własny 10%: zaprojektowanie i przeprowadzenie części badań laboratoryjnych stanowiących przedmiot treści zawartych w książce.</p>
<b>K5</b>	<p>Barbara Rolka, Karol Dudek, Michał Płotek, <b>Elżbieta Szostak</b>, Tomasz Wichur, Kinga Orwat <i>Ostatni dzwonek przed maturą z chemii: powtórz, usystematyzuj, zapamiętaj. Zbiór zadań</i> <b>Książka: Fundacja Pro Chemia przy Wydziale Chemii UJ, Kraków (2014) 1-275.</b> <b>ISBN 978-83-938424-1-4</b></p> <p>Udział własny 40%: koncepcja i plan stworzenia zbioru zadań dla uczniów profilu podstawowego, nadzór na etapie tworzenia zbioru i jego wdrażania, nadzór na etapie prowadzenia badań statystycznych w zakresie stopnia poziomu trudności zawartych w nim treści, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji.</p>

#### 4. Publikacje w czasopismach i materiałach spoza bazy JCR

##### Publikacje po uzyskaniu stopnia doktora

<b>P14</b>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b> <i>O tlenkach mieszanych też uczymy w szkole</i> <b>Niedzialki 2/2009 43-47, wyd. Fundacja PRO CHEMIA Kraków (2009)</b> <b>ISSN 1425-8994.</b></p> <p>Udział własny 100%</p>
<b>P15</b>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Joanna Hetmańczyk <i>Rozwój wiedzy o budowie atomów</i> <b>Niedzialki 2/2010 (79) 39-42.</b> <b>ISSN 1425-8994.</b></p> <p>Udział własny 50%: koncepcja części własnej artykułu, zebranie informacji na temat części treści jakie zostały zaprezentowane w artykule, wykonanie rysunków, wspólna redakcja tekstu końcowego publikacji.</p>

P16	<p><b>Elżbieta Szostak*</b> <i>Jak uczniowie mogą doświadczyć, czym jest nauka?</i> <i>Project ESTABLISH</i></p> <p><b>Biuletyn Polskiego Stowarzyszenia Nauczycieli Przedmiotów Przyrodniczych, Nauczanie Przedmiotów Przyrodniczych, 35 (3/2010) 49-50.</b> <b>ISSN 1509-6351.</b> Udział własny 100%</p>
P17	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Ewa Odrowąż <i>Wskaźniki kwasowo-zasadowe</i></p> <p><b>Biuletyn Polskiego Stowarzyszenia Nauczycieli Przedmiotów Przyrodniczych, Nauczanie Przedmiotów Przyrodniczych, 36 (4/2010) 49-51.</b> <b>ISSN 1509-6351.</b> Udział własny 50%: koncepcja części własnej artykułu, zebranie informacji na temat treści jakie zostały w nim zaprezentowane, zaprojektowanie przedstawionych w artykule doświadczeń i ich opracowanie pod względem dydaktyczno-merytorycznym, wspólna redakcja tekstu końcowego publikacji.</p>
P18	<p>Małgorzata Krzeczowska, Ewa Odrowąż, <b>Elżbieta Szostak*</b> <i>Strategies of Introduction Environmental Protection Issues to the Science Education in Poland,</i> <b>Natural Science Education, 3 (32) (2011) 25-35.</b> <b>ISSN 1648-939 X.</b> Udział własny 40%: koncepcja części własnej artykułu, zebranie informacji na temat treści jakie zostały w nim zaprezentowane, udział w zaprojektowaniu kwestionariusza ankiety i przeprowadzeniu badań na grupie uczniów szkół i studentów, wspólna redakcja tekstu końcowego publikacji, korespondencja z edytorem i recenzentami.</p>
P19	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Ewa Odrowąż, <i>Discussion: the development of this skill in inquiry-based science teaching methodologies,</i> <b>Chem. Didact. Ecol. Metrol. 18 (1-2) (2013) 53-60.</b> Udział własny 55%: koncepcja części artykułu, zebranie informacji na temat treści z zakresu metodologii dydaktyki jakie zostały zaprezentowane w artykule, wspólne przeprowadzenie badań dydaktycznych w trakcie Letniej Szkoły dla nauczycieli, która odbyła się w ramach projektu ESTABLISH w którym byliśmy wykonawcami, wspólna redakcja tekstu końcowego publikacji, korespondencja z edytorem.</p>

<b>P20</b>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Ewa Odrowąż <i>Czy na lekcjach chemii można dowiedzieć się czegoś nowego o świetle?</i> <b>Biuletyn Polskiego Stowarzyszenia Nauczycieli Przedmiotów Przyrodniczych, Nauczanie Przedmiotów Przyrodniczych, 55 (3/2015) 24-29.</b> <b>ISSN 1509-6351</b> Udział własny 50%: koncepcja części własnej artykułu, zebranie informacji na temat treści jakie zostały w nim zaprezentowane, zaprojektowanie przedstawionych w artykule doświadczeń i ich opracowanie pod względem dydaktyczno-merytorycznym, wspólna redakcja tekstu końcowego publikacji.</p>
<b>P21</b>	<p><b>Elżbieta Szostak*</b>, Anna Migdał-Mikuli, Janusz Chruściel, Arkadiusz Rudzki <i>Phase polymorphism of <math>[M(OS(CH_3)_2)_6](ClO_4)_2</math> (<math>M=Mn(II)</math> and <math>Zn(II)</math>) studied by transmitted light intensity and polarized optical microscopy measurements,</i> <b>Eur. Chem. Bull. 4(10) (2015) 471-476.</b> Udział własny 60%: koncepcja badań, zaplanowanie wszystkich pomiarów interpretacja wszystkich otrzymanych wyników, napisanie wstępnej wersji całości artykułu oraz wykonanie wszystkich ilustracji i tabel, wspólna redakcja końcowego tekstu publikacji oraz korespondencja z edytorami i recenzentami.</p>

## 5. Udział w konferencjach naukowych

### Wystąpienie ustne

#### przed uzyskaniem stopnia doktora

1. A. Migdał-Mikuli, **E. Szostak\***, *Badanie przejść fazowych w związku kompleksowym  $[Zn(DMSO)_6](ClO_4)_2$  metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej*, II Ogólnopolskie Seminarium Doktorantów Wydziałów Chemicznych pt.: „Na pograniczu biologii i chemii”, Velke Losiny, Rep. Czeska, 31.03 - 3.04 2004.

#### po uzyskaniu stopnia doktora

2. A. Migdał-Mikuli, E. Szostak, **P. Bernard\***, *Przemiany fazowe i rozkład termiczny  $[Sr(DMSO)_6](ClO_4)_2$* , VI Ogólnopolskie Seminarium Doktorantów Wydziałów Chemicznych pt.: „Na pograniczu biologii i chemii”, Velke Losiny, Rep. Czeska, 20-23 kwietnia 2008.
3. E. Odrowąż, M. Krzeczowska, **E. Szostak\***, *3R, that is reduce, reuse, recycle*, XIV IOSTE Symposium: “Socio-cultural and Human Values in Science and technology Education, Bled, Slovenia, 13-18 June 2010.
4. M. Krzeczowska, E. Odrowąż, **E. Szostak\***, *The role of science trip in formal and informal science education in Poland*, ASE Annual Conference, Liverpool, UK, 4-7 January 2012.
5. **E. Szostak\***, E. Odrowąż, I. Maciejowska, *Discussion: the development of this skill in inquiry-*

*based science teaching metodologie*, The first scientific symposium „Theory and practice of science in society: From crises to knowledge society, University of Belgrade, Belgrad, 14-16 November 2012.

6. **E. Szostak\***, A. Migdał-Mikuli, *Polimorfizm związków kompleksowych typu  $[M(DMSO)_6](ClO_4)_2$  na przykładzie chloranu(VII) heksadimetylosulfotlenku manganu(II)*, IX Ogólnopolska Konferencja "Rozpraszanie neutronów i metody komplementarne w badaniach fazy skondensowanej", Siedlce - Chlewiska, 7-11 Czerwca 2015.

#### Plakaty konferencyjne- przed doktoratem

1. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, J. Serwońska, **E. Szostak\***, *Badanie przemian fazowych w kompleksie  $[Cd(DMSO)_6](ClO_4)_2$* , Materiały XLV Zjazdu Naukowego PTCh, Kraków, 9-13 września 2002.
2. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **E. Szostak\***, *Phase polymorphism of  $[M(DMSO)_6](ClO_4)_2$  compounds studied by differential scanning calorimetry  $M = Mn, Co$  and  $Cd$* , 9<sup>th</sup> Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, Zakopane, 31 sierpień – 5 września 2003.
3. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **E. Szostak\***, A. Wesełucha-Birczyńska, *Solid-Solid Phase Transition in  $[Co(DMSO)_6](ClO_4)_3$  Studied by Infrared Spectroscopy*, EUCMOS XXVII, Kraków, 5-10 Września 2004.
4. **E. Szostak\***, A. Migdał-Mikuli, *Stabilne i Metastabilne Fazy  $[Co(DMSO)_6](ClO_4)_2$* , XIV Ogólnopolska Konferencja "Kryształy Molekularne", Częstochowa-Złoty Potok, 21-25 września 2004.
5. **W. Nitek\***, E. Szostak, *Struktura krystaliczna związków kompleksowych  $[Co(DMSO)_6](ClO_4)_2$  i  $[Mn(DMSO)_6](ClO_4)_2$* , 47 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław, 30 czerwca-1 lipca 2005.

#### Plakaty konferencyjne- po doktoracie

6. A. Migdał-Mikuli, **E. Szostak\***, *Badania polimorfizmu fazowego grupy związków kompleksowych typu  $[M(DMSO)_6](ClO_4)_2$  (gdzie  $M = Zn, Co$  i  $Ni$ ) prowadzone metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej*, XV Ogólnopolska Konferencja Kryształy Molekularne, Łódź, 19-23 września 2006.
7. Ł. Skoczylas, A. Migdał-Mikuli, **E. Szostak\***, *Phase polymorphism of  $[Co(DMSO)_6](BF_4)_2$  and  $[Co(DMSO)_6](ClO_4)_2$* , 9<sup>th</sup> European Symposium on Thermal Analysis and Calorimetry, Kraków, 27-31 August 2006.
8. **E. Szostak\***, A. Rudzki, J. Chruściel, *Phase polymorphism of  $[Cd(DMSO)_6](ClO_4)_2$  studied by differential scanning calorimetry and transmitted light intensity methods and observed using thermal microscope*, E-MRS 2006 Fall Meeting, Warszawa, 4-8 września, 2006.
9. **E. Szostak\***, Ł. Skoczylas, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, *Phase polymorphism of  $[Ni(DMSO)_6](ClO_4)_2$  and  $[Ni(DMSO)_6](BF_4)_2$  compounds studied by differential scanning calorimetry*, E-MRS 2006 Fall Meeting, Warszawa, 4-8 września, 2006.
10. **E. Szostak\***, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, *Badania polimorfizmu związków typu:*

- [M(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, (M = Zn, Co i Ni, a DMSO = (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>SO), metodą skaningowej kalorymetrii różnicowej, XV Ogólnopolska Konferencja Kryształy Molekularne, Łódź, 19-23 września 2006.*
11. A. Migdał-Mikuli, **E. Szostak\***, K. Drużbicki, D. Dołęga, *Thermal Decomposition of [Ni(DMSO)<sub>4</sub>]I<sub>2</sub>*, IX Krajowe Seminarium im. Prof. St. Bretsznajdra z udziałem gości zagranicznych, Płock, 26-28 września 2007.
  14. **E. Szostak\***, W. Nitek, A. Migdał-Mikuli, *Crystal structure of [Mn(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> low temperature phase*, VII International Conference of Polymer Structure XIPS, Kraków, 5-7 grudnia 2007.
  15. A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, **E. Szostak\***, *Phase polymorphism of chlorates (VII) heksadimethylsulphoxide –magnesium and –cadmium studied by differential scanning calorimetry*, 38<sup>th</sup> International Conference on Coordination Chemistry, Jerusalem, Israel, 20-25 July 2008.
  16. **E. Szostak\***, A. Migdał-Mikuli, *Polymorphism and decomposition of chlorate(VII) hexadimethylsulphoxidemagnesium*, 10<sup>th</sup> Conference on Calorimetry and Thermal Analysis of the Polish Society of Calorimetry and Thermal Analysis (PTKAT) joint with 2<sup>nd</sup> Czech-Hungarian-Polish-Slovakian Thermoanalytical Conference, Zakopane, 30 sierpnia-3 września 2009.
  17. **E. Szostak\***, *Jak uczniowie mogą doświadczyć, czym jest nauka? Project ESTABLISH*, XVII Zjazd PSNPP, Toruń, 18-19 wrzesień 2010.
  18. **E. Szostak\***, **E. Odrowąż\***, *Wskaźniki kwasowo-zasadowe*, XVII Zjazd PSNPP, Toruń, 18-19 wrzesień 2010. **Plakat nagrodzony II miejscem.**
  19. J. Kutwicka, A. Migdał-Mikuli, **E. Szostak\***, *Phase transition and molecular motions in [Cu(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry and infrared spectroscopy*. Abstracts of 33<sup>rd</sup> International Conference on Vacuum Microbalance and Thermoanalytical Techniques IVMTTC<sup>33</sup>, Zamość, 26-30 czerwca 2011.
  20. A. Migdał-Mikuli, **E. Szostak\***, P. Bernard, *Low-temperature phase transitions in [Cd(DMSO)<sub>6</sub>](BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry and infrared absorption spectroscopy*, 1<sup>st</sup> Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, Craiova, Romania, CEEC-TAC1, 7-10 September 2011.
  21. **E. Szostak\***, A. Migdał-Mikuli, P. Bernard, *Phase transitions in [Sr(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> studied by differential scanning calorimetry and infrared absorption spectroscopy*, 1<sup>st</sup> Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, CEEC-TAC1, Craiova, Romania, 7-10 September 2011.
  22. P. Bernard, P. Broś, M. Krzeczowska, **E. Odrowąż\***, I. Maciejowska, **E. Szostak\***, *Training for Polish chemistry teachers within the ESTABLISH project*, ASE Annual Conference, Liverpool, UK, 4-7 January 2012.
  23. **N. Górska\***, A. Migdał-Mikuli, E. Mikuli, E. Szostak, A. Inaba, Y. Hirao, *Structure, molecular reorientation and phase transitions in novel [Sr(DMSO)<sub>4</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]*, The 2<sup>nd</sup> EuCheMS Inorganic Chemistry Conference, Jerusalem, Israel, 7-11 July 2013.
  24. **E. Szostak\***, A. Migdał-Mikuli, *Phase Polymorphism of [Zn(DMSO)<sub>6</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> Studied by Vibrational Spectroscopy*, XII<sup>th</sup> International Conference on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska, 8-12 września 2013.
  25. E. Szostak, **J. Hetmańczyk\***, A. Migdał-Mikuli, *Dynamical properties and phase transition*



in  $[Mn(DMSO)_6](ClO_4)_2$  studied by vibrational spectroscopies (IR and IINS), St. Petersburg, Old Peterhof, 27-31 October 2014.

26. E. Szostak\*, A. Migdał-Mikuli, *Thermodynamic properties of phase transitions in  $[Ni(DMSO)_6](ClO_4)_2$  and its deuterated analogue*, 3<sup>rd</sup> Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, CEEC-TAC3, Ljubljana, Slovenia, 25-28 August 2015.
27. E. Szostak\*, E. Odrowąż\*, *Czy na lekcjach chemii można dowiedzieć się czegoś nowego o świetle?*, XXII Zjazd PSNPP, Toruń, 19-20 wrzesień 2015. **Plakat nagrodzony II miejscem.**
28. E. Szostak\*, E. Odrowąż\*, *Czy wawelski smok wpływa na krakowski smog?*, XXIII Zjazd PSNPP, Toruń, 9-11 wrzesień 2016. **Plakat nagrodzony III miejscem.**
29. E. Szostak\*, A. Migdał-Mikuli, *Charakterystyka przemian fazowych w  $[Zn(DMSO)_6](ClO_4)_2$  i  $[Zn(DMSO)_6](BF_4)_2$* , III Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej – poświęcone pamięci Profesora Adama Bielańskiego, Kraków, 7-9 grudnia 2016.

#### C.4. Nagrody i wyróżnienia

1. Nagroda Zespołowa I stopnia J.M. Rektora UJ – 5. XI. 2007 r.
2. Nagroda Zespołowa III stopnia J.M. Rektora UJ – 23. XI. 2012 r.
3. Nagroda Dyrektora Katolickiego Centrum Edukacyjnego Caritas Archidiecezji Krakowskiej za wybitne osiągnięcia w pracy zawodowej w roku 2011/2012
4. Medal brązowy za Długoletnią Służbę – 14.X.2016

#### C.5. Projekty badawcze

##### Wykonawstwo w projektach naukowo-badawczych

1. 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 iodoniumphotoinitiators for cationic polymerization"; temat grantu 04-4-1069-2009/2014.
2. Grant badawczy Pełnomocnego Przedstawiciela Rządu RP ds. ZIBJ w Dubnej i Dyrekcji 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 iodoniumphotoinitiators for cationic polymerization"; temat grantu 04-4-1069-2009/2014.
3. Projekt **ESTABLISH** "European Science and Technology in Action Building Links with Industry, Schools and Home", dofinansowywanym z Siódmego Programu Ramowego Unii Europejskiej [FP7/2007-2013], nrgrantu244749 – Wykonawca w latach 2010-2013.

### **Wykonawstwo w grantach zewnętrznych**

2011/2012 - Uczestnik w projekcie POKL.08.02.01-12-054/10 - „Wzmocnienie Przedsiębiorczości oraz świadomości w zakresie współpracy nauka-biznes wśród małopolskich pracowników naukowych sposobem na wzrost innowacyjności i konkurencyjności małopolskich firm”. Odbycie w ramach projektu stażu naukowego w F.P.H.U. Oskar, ul. Kuczkiewicza 6, 32-020 Wieliczka.

2012/2013 - Uczestnik w projekcie „SPiN – Skuteczny Przedsiębiorca i Naukowiec”, nr projektu WND-POKL.08.02.01-12-048/10, realizowanego w ramach priorytetu VIII. Regionalne kadry gospodarki, działanie Transfer wiedzy, poddziałanie Wsparcie dla współpracy sfery nauki i przedsiębiorstw. Odbycie w ramach projektu stażu naukowego w Consil Polska Sp. z o.o., ul. Magazynowa 5a, 30-858 Kraków.

2014 – Uczestnik w projekcie Nauka dla biznesu – szkolenia i doradztwo dla przedsiębiorstw, nr umowy: POKL.08.02.01-12-016/12-00. Organizator: Poznański Akademycki Inkubator Przedsiębiorczości.

## **C.6. Współpraca krajowa i zagraniczna**

### **Krajowe ośrodki naukowe**

Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu

### **Zagraniczne ośrodki naukowe**

Research Centre of Molecular Thermodynamics, Graduate School of Science, Osaka University, Toyonaka, Osaka 56-0043, Japan

Chemical Research Centre Hungarian Academy of Sciences, H-1025, Budapest, Pusztaszeri u. 59-67, Hungary

Joint Institute for Nuclear Research, Frank Laboratory of Neutron Physics, Dubna, Moscow region, Joliot-Curie str. 6, Russia

## Współpraca z firmami z branży chemicznej

Consil Polska Sp. z o.o., ul. Ostania 2F/25, Kraków

Bielenda Kosmetyki Naturalne Sp. z o.o. S.K.A., ul. Fabryczna 20, Kraków

Laboratorium Kosmetyków Naturalnych Farmona Sp. z o.o., ul. Jugowicka 10C, Kraków

## C.7. Recenzje prac naukowych

Rodzaj recenzji	Liczba recenzji
<b>Prace licencjackie</b>	3
<b>Prace magisterskie</b>	8
<b>Publikacje w czasopismach zagranicznych</b>	
J. Therm. Anal. Cal.	2
Vibr. Spectrosc	2
Spectrochim. Acta Part A.	1
J. Mol. Struct.	1
<b>Razem</b>	<b>17</b>

## C.8. Pełnienie roli eksperta

- 2010-2013 – **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.
- Od 2012 r. do chwili obecnej – **członek** zespołu oceniającego uczestników olimpiady chemicznej.
- Od 2014 r. do chwili obecnej – **członek** zespołu oceniającego uczestników wojewódzkiego konkursu wiedzy chemicznej.

## Część D: Podsumowanie najważniejszych aspektów działalności, dydaktycznej organizacyjnej i eksperckiej.

### D.1. Działalność dydaktyczna

#### 1. Wykłady, seminaria i ćwiczenia laboratoryjne

- **Wykład z dydaktyki chemii** - dla studentów specjalności nauczyciel chemii Państwowej Wyższej Szkoły Zawodowej w Tarnowie.
- **Metodyka nauczania chemii** - seminarium specjalizacyjne dla studentów Wydziału Chemii UJ.
- **Fotochemia i spektroskopia optyczna** - seminarium specjalizacyjne dla studentów Wydziału Chemii UJ.
- **Chemia ogólna i nieorganiczna** - ćwiczenia laboratoryjne oraz konwersatoria dla studentów Wydziału Biologii i Nauk o Ziemi UJ.
- **Spektroskopia molekularna** - ćwiczenia laboratoryjne (Spektroskopia Kształtu Pasma, Spektroskopia IR) i konwersatoryjne (Spektroskopia IR, Spektroskopia NMR) dla studentów Wydziału Chemii UJ.
- **Metody instrumentalne w analizie środowiskowej** - ćwiczenia laboratoryjne dla studentów Wydziału Chemii UJ.
- **Dydaktyka chemii li II** - seminarium specjalizacyjne dla studentów Wydziału Chemii UJ
- **Chemia ogólna z elementami chemii fizycznej** - ćwiczenia laboratoryjne dla studentów Biofizyki Wydziału Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ.
- **Chemia analityczna** - ćwiczenia laboratoryjne dla studentów Wydziału Chemii UJ.

#### 2. Zajęcia dydaktyczne nie objęte programem studiów kierunkowych

- 2010 - 2011 - **zajęcia autorskie** z dydaktyki chemii prowadzone na Kursie przygotowania Pedagogicznego - Państwowa Wyższa Szkoła Zawodowa w Tarnowie.
- 2012 - do chwili obecnej - **Prowadzenie warsztatów** dla uczniów LO im. Świętej Rodziny z Nazaretu w ramach patronatu UJ.
- 2013 - **Mentor** - szkolenie nauczycieli Uniwersytet Dziecięcy - Kraków.
- 2013 - 2015 - **Prowadzenie autorskich warsztatów dla dzieci** - Wielicki Uniwersytet

Dziecięcy organizowany przez Urząd Miasta i Gminy Wieliczka.

- 2008/2010 i 2013/2015 opiekun dydaktyczny - Zuzanna Jęcek, Kuba Jęcek- praca realizowana w ramach: **"Małopolskiego programu stypendialnego dla uczniów szczególnie uzdolnionych"** (Poddziałanie 9.1.3 PO KL).

### 3.Kształcenie młodej kadry naukowej

#### 3.1. Zrealizowane prace licencjackie

1. Dominika Dyjak, *"Badanie właściwości fizyko-chemicznych emulsji typu o/w oraz w/o znajdujących się w ofercie firmy handlowo-usługowej "Oskar" pod kątem ich wpływu na środowisko naturalne"*, studentka kierunku chemia środowiskowa, 2013.
2. Paweł Dratwa, *"Badania właściwości fizykochemicznych surfaktantów hydrofobowych znajdujących się w ofercie firmy handlowo-usługowej „Consil Polska”"*, student kierunku chemia środowiskowa, 2013.
3. Daniel Badura, *"Badanie wpływu na środowisko surfaktantów hydrofobowych obecnych w produktach firmy „Consil Polska”"*, student kierunku chemia środowiskowa, 2013.

#### 3.2. Zrealizowane prace magisterskie

1. Barbara Drabik, *"Opracowanie zbioru zadań z chemii dla uczniów szkół ponadgimnazjalnych w oparciu o nową podstawę programową"*, studentka kierunku chemia, 2013.
2. Jadwiga Kutwicka, *"Badanie polimorfizmu związku kompleksowego  $[Cu(DMSO)_6](ClO_4)_2$ "*, studentka kierunku chemia, 2013.
3. Daniel Badura, *"Charakterystyka wybranych parametrów fizyko-chemicznych olejów silnikowych oraz ocena wpływu na środowisko procesu ich użytkowania"*, student kierunku chemia środowiskowa, 2015.
4. Dominika Dyjak, *"Badania fizyko-chemiczne prowadzone z zastosowaniem metod spektroskopowych nowej linii kosmetyków firmy „Farmona” pod kątem ich funkcjonalności i wpływu na środowisko naturalne"*, studentka kierunku chemia środowiskowa, 2015.

## **D.2. Działalność organizacyjna**

- 2008-do chwili obecnej -udział w organizacji **Wojewódzkiego Konkurs Wiedzy Chemicznej organizowanego przez Zakład Dydaktyki Chemii oraz Fundację PRO CHEMIA przy Wydziale Chemii UJ.**
- 2008-do chwili obecnej - udział w organizacji **sesji naukowych dla nauczycieli organizowanych przez Zakład Dydaktyki Chemii UJ oraz Sekcja Dydaktyczną Polskiego Towarzystwa Chemicznego.**
- 11 do 14 maja 2011 - udział w organizacji **XI Festiwalu Nauki w Krakowie.**
- 15 - 18 września 2011 - **członek komitetu organizacyjnego I Ogólnopolskiego Forum Młodych Chemików.**

*Elżbieta Szostak*