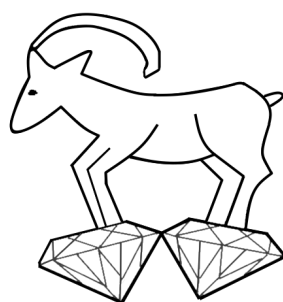


VII Ogólnopolska Konferencja

Kryształki Molekularne 2023

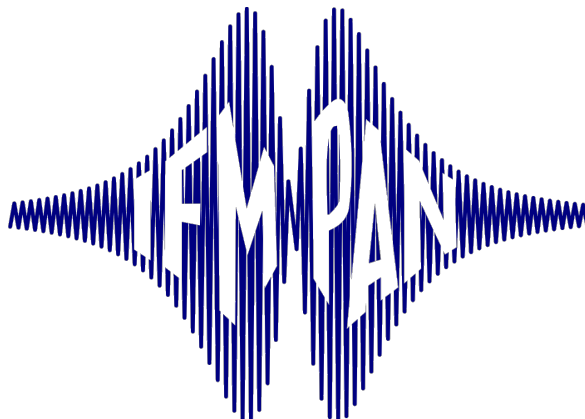
Program i streszczenia



Poznań, 13-15 września 2023

Kryształki Molekularne 2023, Poznań, 13-15 września 2023

Organizator: Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk



Komitet Organizacyjny

Przewodniczący: Andrzej Łapiński

Sekretarz: Sylwia Zięba

Skarbnik: Kornelia Lewandowska

Bolesław Barszcz

Arkadiusz Frąckowiak

Adam Mizera

Iwona Olejniczak

Roman Świetlik

Praca zbiorowa

Redaktorzy: Bolesław Barszcz, Andrzej Łapiński, Roman Świetlik

Opracowanie redakcyjne i skład: Bolesław Barszcz

Wydawca: Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk

ISBN: 978-83-968462-0-4

Druk: Wieland

Projekt okładki: Bolesław Barszcz

Komitety Naukowy

Michał Banaszak – Uniwersytet im. Adama Mickiewicza
Stanisław Bartkiewicz – Politechnika Wroclawska
Andrzej Budziak – AGH Kraków
Piotr Bujak – Politechnika Warszawska
Przemysław Data – Politechnika Śląska; Durham University
Alina Dudkowiak – Politechnika Poznańska
Andrzej Eilmes – Uniwersytet Jagielloński
Ewa Gondek – Politechnika Krakowska
Jarosław Jung – Politechnika Łódzka
Ewa Juszyńska-Gałązka – Instytut Fizyki Jądrowej PAN
Irena Kulszewicz-Bajer – Politechnika Warszawska
Andrzej Łapiński – Instytut Fizyki Molekularnej PAN
Beata Łuszczynska – Politechnika Łódzka
Małgorzata Makowska-Janusik – Uniwersytet Humanistyczno-Przyrodniczy im. J. Długosza w
Częstochowie
Katarzyna Matczyszyn – Politechnika Wroclawska
Olaf Morawski – Instytut Fizyki PAN
Marcin Nyk – Politechnika Wroclawska
Andrzej Sobolewski – Instytut Fizyki PAN
Waldemar Stampor – Politechnika Gdańska

Honorowy Komitet Naukowy

Grzegorz Bąk – Politechnika Łódzka
Jan Godlewski – Politechnika Gdańska
Jeremiasz K. Jeszka – Politechnika Łódzka
Bolesław Kozankiewicz – Instytut Fizyki PAN
Bogdan Kuchta – Politechnika Wroclawska
Tadeusz Luty – Politechnika Wroclawska
Mieczysław Łapkowski – Politechnika Śląska
Andrzej Miniewicz – Politechnika Wroclawska
Wojciech Nawrocik – Uniwersytet im. Adama Mickiewicza
Piotr Petelenz – Uniwersytet Jagielloński
Adam Proń – Politechnika Warszawska
Marek Samoć – Politechnika Wroclawska
Lucjan Sobczyk – Uniwersytet Wroclawski
Juliusz Sworakowski – Politechnika Wroclawska
Roman Świetlik – Instytut Fizyki Molekularnej PAN
Jacek Ulański – Politechnika Łódzka
Jacek Waluk – Instytut Chemii Fizycznej PAN
Tadeusz Wasiutyński – Instytut Fizyki Jądrowej PAN
Danuta Wróbel – Politechnika Poznańska
Małgorzata Zagórska – Politechnika Warszawska
Piotr Zieliński – Instytut Fizyki Jądrowej PAN

Kryształki Molekularne 2023, Poznań, 13-15 września 2023

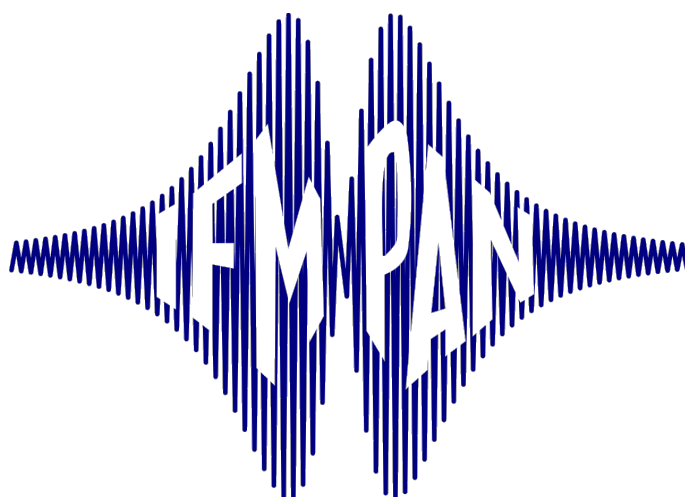
Patroni i sponsorzy



Polskie Towarzystwo Fizyczne
Oddział Poznański



**WYDZIAŁ
INŻYNIERII MATERIAŁOWEJ
I FIZYKI TECHNICZNEJ**



Instytut Fizyki Molekularnej PAN

Historia Instytutu Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk (IFM PAN) rozpoczęła się w 1954 roku wraz z utworzeniem w Poznaniu filii warszawskiego Instytutu Fizyki PAN. Na przestrzeni lat trzy zakłady naukowe kierowane przez profesorów Szczepana Szczeniowskiego, Arkadiusza Piekareę oraz Jana Stankowskiego ukształtowały kierunki badawcze oraz zapewniły kadre naukową dla nowo powstającego Instytutu Fizyki Molekularnej, który jako samodzielna placówka Polskiej Akademii Nauk zaczął funkcjonować w 1975 roku. Od momentu powołania przedmiotem działalności Instytutu było prowadzenie badań naukowych w zakresie fizyki molekularnej, ze szczególnym uwzględnieniem radiospektroskopii ciała stałego, oddziaływań molekularnych w fazie skondensowanej, czy teorii magnetyzmu i technologii cienkowarstwowych materiałów magnetycznych. Oryginalne logo Instytutu powstałe na bazie widma elektronowego rezonansu paramagnetycznego do dziś jest znakiem rozpoznawczym Instytutu na arenie krajowej oraz międzynarodowej.



Obecnie w IFM PAN funkcjonuje osiem zakładów naukowych, w których prowadzone są badania metodami doświadczalnymi oraz teoretycznymi, między innymi w zakresie właściwości magnetycznych, transportowych, mechanicznych, elektrycznych i optycznych materiałów funkcyjnych, metamateriałów, hybrydowych układów przewodzących, związków międzymetalicznych i stopów metastabilnych strukturalnie, semimetali topologicznych, mieszanin ciekłokrystalicznych, cieczy i dielektrycznych układów molekularnych. Ponadto prowadzone są badania struktury elektronowej i właściwości termodynamicznych materiałów kwantowych, dynamiki spinowej w nanomateriałach węglowych i innowacyjnych ferroikach, a także w obszarze komunikacji i kryptologii kwantowej. W zaawansowanych laboratoriach technologicznych wytwarzane i charakteryzowane są funkcjonalne układy warstwowe oraz nanostruktury.

Każdego roku pracownicy i doktoranci IFM PAN publikują około 100 prac naukowych w zakresie fizyki fazy skondensowanej oraz angażują się w pozyskiwanie i realizację interesujących projektów badawczych. Instytut jest współorganizatorem cyklicznych i rozpoznawalnych konferencji oraz warsztatów naukowych, w tym m.in. „Physics of Magnetism” (od 1975 r.), „Structural and Ferroelectric Phase Transitions” (od 1979 r.), czy „Lato z Helem” (od 1985 r.). IFM PAN wspólnie z czterema instytutami Polskiej Akademii Nauk (ICHB PAN, ID PAN, IGCz PAN i IGR PAN) kształci doktorantów w ramach Poznańskiej Szkoły Doktorskiej Instytutów PAN. Od wielu lat Instytut prowadzi współpracę z licznymi zagranicznymi i krajowymi ośrodkami naukowymi, w tym z uczelniami z regionu, m.in. z Wydziałem Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej, w ramach której studenci odbywają w Instytucie praktyki, staże oraz przygotowują prace dyplomowe. Instytut przywiązuje także uwagę do popularyzacji wiedzy wśród uczniów poprzez dedykowane projekty i programy (np. „Noc Naukowców”, cykl wykładów „Fizyka warta Poznania”, czy Ogólnopolski Konkurs Konstruktorski – „Fizyka w ruchu”). Instytut angażuje się również w szereg inicjatyw, które mają na celu poprawę funkcjonowania społeczeństwa i gospodarki poprzez propagowanie istotnych wyników innowacyjnych badań naukowych (np. w zakresie technologii wodorowych).

Kryształki Molekularne 2023, Poznań, 13-15 września 2023



Polskie Towarzystwo Fizyczne Oddział Poznański

c/o Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk
ul. Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań
www.ptf.net.pl/poznan, e-mail: poznan@ptf.net.pl
tel. (61) 86 95 201, fax: (61) 86 84 524

Poznań, 30 sierpnia 2023 roku

Szanowni Państwo,

Zarząd Oddziału Poznańskiego Polskiego Towarzystwa Fizycznego podjął decyzję o objęciu honorowym patronatem konferencji Kryształki Molekularnej'23, która ma się odbyć w Instytucie Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu w dniach 13-15 września 2023.

Celem działania Polskiego Towarzystwa Fizycznego jest upowszechnianie fizyki i nauk pokrewnych, podnoszenie ogólnego poziomu wiedzy fizycznej w społeczeństwie oraz popieranie rozwoju fizyki w Polsce. Swoje cele PTF realizuje w szczególności przez wspieranie badań w dziedzinie fizyki i ich nagradzanie oraz upowszechnianie.

Polskie Towarzystwo Naukowe rokrocznie przyznaje szereg nagród: *Nagroda naukowa im. Wojciecha Rubinowicza* za artykuł lub serię artykułów opublikowanych w okresie pięciu lat kalendarzowych poprzedzających rok złożenia wniosku, *Nagroda doktorska im. Zygmunta Florentego Wróblewskiego* za rozprawę doktorską obronioną w roku kalendarzowym poprzedzającym rok złożenia wniosku, *Nagroda Magisterska im. Arkadiusza Piekary* za pracę magisterską obronioną w roku kalendarzowym poprzedzającym rok złożenia wniosku, *Nagroda i Medal za Popularyzację im. Krzysztofa Ernsta* za wybitną działalność popularnonaukową w okresie trzech lat kalendarzowych poprzedzających rok złożenia wniosku, *Nagroda za Artykuł Popularnonaukowy* za wyróżniający się artykuł popularnonaukowy oraz *Nagroda za najlepszą pracę magisterską z optyki i fotoniki* za najlepszą pracę magisterską z optyki i fotoniki.

Oddział Poznański Polskiego Towarzystwa Fizycznego ufunduje trzy nagrody dla uczestników konferencji Kryształki Molekularne'23 za najlepsze wystąpienia ustne. Wszystkim uczestnikom konferencji życzymy owocnych obrad, nawiązania współpracy naukowej oraz miłych wspomnień ze stolicy Wielkopolski.

Z wyrazami szacunku

POLSKIE TOWARZYSTWO FIZYCZNE
ODDZIAŁ POZNAŃSKI
c/o ul. Mariana Smoluchowskiego 17
60-179 Poznań

PRZEWODNICZĄCY
Oddziału Poznańskiego PTF
A. Łapiński
dr hab. Andrzej Łapiński, prof. IFM PAN

.....
(Przewodniczący Oddziału Poznańskiego PTF)



POLITECHNIKA POZNAŃSKA



WYDZIAŁ
INŻYNIERII MATERIAŁOWEJ
I FIZYKI TECHNICZNEJ

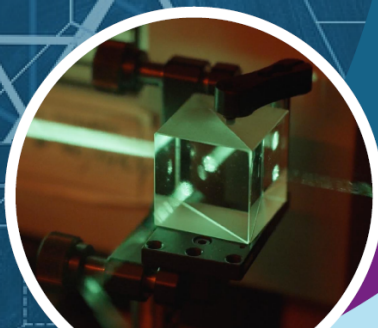
Kształcimy najlepszych specjalistów na kierunkach:



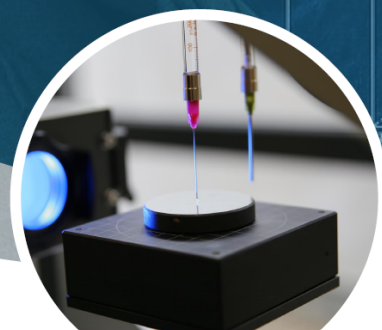
PRYZNANO NAM:
Kategoria naukowa **A+**
- poziom wiodący
w dyscyplinie **inżynieria materiałowa**



Edukacja
techniczno - informatyczna



Fizyka techniczna



Inżynieria materiałowa



ZMIENIAMY OBLICZE NAUKI

O nas

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej prowadzi badania w szerokim zakresie tematyki materiałowej związanej z jej projektowaniem, wytwarzaniem i charakteryzacją, jak również symulacją zjawisk oraz procesów. Wysoce specjalistyczne i unikalne metody badawcze dostępne w zasobach Wydziału, pozostają również istotnym wsparciem dla wielu badań interdyscyplinarnych prowadzonych w kraju oraz poza granicami.

Wydział Inżynierii Materiałowej
i Fizyki Technicznej

Zapraszamy studentów i doktorantów!

- studia stacjonarne I i II stopnia
- studia doktorskie
- praktyki i staże
- koła naukowe
- klasy akademickie

Bądźmy w kontakcie

Dziekanat WIMiFT
ul. Piotrowo 3, 60-965 Poznań
office_dtpf@put.poznan.pl
www.phys.put.poznan.pl



Nasza strona



Film promocyjny
WIMiFT





Wiodące innowacje FT-IR, FT-NIR i Raman

- Spektrometry FTIR do badań rutynowych i badawczych**
Najszerza paleta produktów na rynku, od kompaktowego spektrometru ALPHA II po IFS125HR z najwyższą rozdzielczością dla wszystkich rutynowych, badawczych i naukowych zastosowań.
- Mikroskopy FT-IR**
LUMOS jest wolnostojącym mikroskopem FTIR z pełną automatyką. Został zaprojektowany w celu połączenia najlepszych możliwości w zakresie kontroli wzrokowej i analizy spektralnej w podczerwieni z najwyższym komfortem użytkownika.
- Spektrometry FT-NIR**
Intuicyjnie spektrometry dyspersyjne i FT-Ramana oraz mikroskopy o wysokiej rozdzielczości spektralnej, doskonale nadające się do badań i kontroli jakości.
- Spektrometry Ramana**
Najszerza paleta produktów na rynku, od kompaktowego spektrometru ALPHA II po IFS125HR z najwyższą rozdzielczością dla wszystkich rutynowych, badawczych i naukowych zastosowań.
- Analizatory gazów FT-IR**
Seria MATRIX MG to wytrzymałe, wysokowydajne analizatory fazy gazowej w średniej podczerwieni do zastosowań procesowych i badawczych.

Bruker Polska oferuje najbardziej zaawansowane spektrometry FT-IR, FT-NIR, Raman i TeraHertz, aby spełnić wszystkie wymagania stawiane przez codzienną pracę naukową i w kontroli jakości. Niezliczone innowacje wdrożone w naszych spektrometrach, są uosobieniem naszej filozofii bycia liderem wydajności w naukach przyrodniczych i systemach analitycznych.

Skontaktuj się z nami: www.bruker.com/optics

Bruker Polska Sp.z o.o.
Budziszynska 69
60-179 Poznań
Tel. +48 61 868 90 08
Fax. +48 61 868 90 96
Email: bruken.polska@bruken.com

Innovation with Integrity

Spectroscopy

Przedmowa

Serdecznie witamy na VII Ogólnopolskiej Konferencji “Kryształki Molekularne”. Konferencja jest wydarzeniem towarzyszącym Ogólnopolskiej Konferencji Kryształki Molekularne, której początki sięgają 1977 roku. Celem Konferencji Kryształki Molekularne jest przekazanie wiedzy oraz wymiana doświadczeń pomiędzy młodymi fizykami, chemikami i inżynierami materiałowymi w zakresie badań kryształów molekularnych, ciekłych kryształów, polimerów, szkieł molekularnych, kompozytów, nanokompozytów, nanocząstek i pojedynczych molekuł.

Ogólnopolska Konferencja Kryształki Molekularne pierwszy raz została zorganizowana we wrześniu 2011 roku we Wrocławiu. Kolejne konferencje odbywały się w Gdańsku (2013), Krakowie (2015), Warszawie (2017), Łodzi (2019) oraz Częstochowie (2021). Tym razem na miejsce obrad wybraliśmy Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu. W tym miejscu chcielibyśmy podziękować Dyrekcji Instytutu za wydatne wsparcie a Oddziałowi Poznańskiemu Polskiego Towarzystwa Fizycznego oraz Wydziałowi Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej za patronat honorowy.

Mamy nadzieję, że dzięki Państwa obecności tegoroczna konferencja będzie okazją do wysłuchania serii interesujących wykładów. Najlepsze prace zostaną nagrodzone przez Oddział Poznański Polskiego Towarzystwa Fizycznego, który w przyszłym roku obchodzić będzie 100-lecie swojego istnienia.

Wszystkim Uczestnikom życzymy wielu wartościowych kontaktów i dyskusji naukowych.

Andrzej Łapiński

Kryształki Molekularne 2023, Poznań, 13-15 września 2023

Program Konferencji

Środa 13 września 2023

15:00 – 16:00 Rejestracja uczestników

Sesja I (przewodniczący: A. Łapiński)

16:00 – 16:20 Otwarcie Konferencji

16:20 – 17:20 **Wykład inauguracyjny:** J. Spałek

17:20 – 17:40 J. Goszyk

17:40 – 18:00 K. Bruchal

18:00 – 18:30 **Sesja Posterowa:** P. Ławniczak, A. Mizera, K. Rytel, A. Schlichtholz,
A. Stachowiak, M. Wojcieszak

19:00 *Kolacja*

Czwartek 14 września 2023

Sesja II (przewodniczący: R. Świetlik)

09:00 – 09:40 **Wykład zaproszony:** K. Rytel

09:40 – 10:00 A. Martin

10:00 – 10:20 A. Mylkie

10:20 – 10:40 *Przerwa kawowa*

Sesja III (przewodnicząca: K. Lewandowska)

10:40 – 11:00 A. Grundt

11:00 – 11:20 M. Hancharova

11:20 – 11:40 P. Radomski

11:40 – 12:00 J. Popławski

12:00 – 12:20 S. Zięba

13:00 – 14:00 *Obiad*

14:00 – 19:00 *Wycieczka*

Piątek 15 września 2023

Sesja IV (przewodnicząca: I. Olejniczak)

09:00 – 09:40 **Wykład zaproszony:** P. Ławniczak

09:40 – 10:00 M. Szczęsny

10:00 – 10:20 M. Mleczko

10:20 – 10:40 *Przerwa kawowa*

Sesja V (przewodniczący: A. Łapiński)

10:40 – 11:00 T. Banaszek

11:00 – 11:20 K. Łupińska

11:20 – 11:40 M. Sawińska

11:40 – 12:00 M. Hendzel

12:00 – 12:40 *Przerwa kawowa / Obrady Komisji Konkursowej*

12:40 – 13:00 Zakończenie Konferencji

Kryształki Molekularne 2023, Poznań, 13-15 września 2023

Streszczenia

Kryształki Molekularne 2023, Poznań, 13-15 września 2023

Wykład inauguracyjny

METALIZACJA MOLEKULARNEGO WODORU I JEGO STAN NADPRZEWODZĄCY*

Józef Spalek**

Instytut Fizyki Teoretycznej, Uniwersytet Jagielloński, Kraków
e-mail: jozef.spalek@uj.edu.pl

W wykładzie przedstawię podstawowe własności molekuly wodoru oraz zjawisko metalizacji kryształu molekularnego wodoru. Część wyników, dotyczącą teoretycznego modelowania tych własności, przedstawię dokładniej, także w postaci animacji komputerowej. Omówię też krótko znaczenie tych zjawisk dla interdyscyplinarnych badań podstawowych i technologii kwantowej.

* Prace finansowane częściowo przez Narodowe Centrum Nauki, grant OPUS nr UMO-2021/41/B/ST3/04070

** Współpraca: Andrzej Biborski, Maciej Hendzel, Andrzej Kądziaława

Wystąpienie ustne

DWUFOTONOWA EMISJA WYBRANYCH BARWNIKÓW ORGANICZNYCH NA BAZIE FLUORENU

**Julia Goszyk¹, Konrad Cyprych¹, Yann Bretonnière², Chantal Andraud²,
Jarosław Myśliwiec¹**

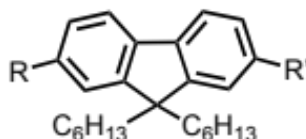
¹Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Wrocław, Polska

²École Normale Supérieure de Lyon, Laboratoire de Chimie, Lyon, Francja

e-mail: 246105@student.pwr.edu.pl

Na przestrzeni ostatnich lat jednymi z najintensywniej rozwijających się dziedzin nauki są m. in. fotonika oraz optoelektronika, które w dużym stopniu opierają się na wykorzystywaniu zjawisk optyki nieliniowej do przetwarzania i przesyłania informacji. W związku z tym istnieje wysokie zapotrzebowanie na poszukiwanie nowych innowacyjnych materiałów charakteryzujących się dużymi nieliniowymi efektami optycznymi, wysokimi wydajnościami kwantowymi oraz wydajną fotostabilnością [1]. Przykładem takich związków są barwniki organiczne typu *push-push*, bądź *pull-pull*, gdzie dwa fragmenty w cząsteczce pełnią rolę odpowiednio donora elektronów, bądź akceptora elektronów, a środek stanowi rdzeń z układem wiązań sprzężonych. Owe liniowe molekuly stanowią potencjalny model w projektowaniu związków o właściwościach możliwych do wykorzystania w procesach optyki nieliniowej [1].

Dzięki swojej budowie strukturalnej, fluoren może zostać użyty jako sprzężony mostek, którego wysoka symetria elektronowa oraz planarność wpływa na zwiększone nakładanie się orbitali i efektywny transfer ładunku. Skutkiem tego, fluoren oraz jego pochodne, charakteryzują się wydajnym procesem dwufotonowej absorpcji i silnymi oddziaływaniami jedno- i wielofotonowymi [2].



Fluoren stanowiący sprzężony rdzeń w teorii związków liniowych.

Ze względu na różnorodność możliwości modyfikacji struktury, a co się z tym wiąże wysoką dostrajalność właściwości związku, rodzina fluorenów jest wysoko rozwinięta i znajduje zastosowanie w m.in. mikroskopii dwufotonowej [2], czy w urządzeniach OLED [3].

W niniejszej pracy przedstawione będą wyniki badań spektroskopowych dotyczące pomiarów dwufotonowej emisji w różnych matrycach, emisji laserowej i rozpraszania Ramana w pochodnych 9,9-diheksyl-9*H*-fluorenu. Otrzymane wyniki pokazują duży potencjał tej grupy związków jako źródło światła generowanego na drodze dwufotonowej absorpcji.

Literatura

- [1] C. Andraud, R. Fortrie, C. Barsu, O. Stéphan, H. Chermette, P. L. Baldeck, *Photoresponsive Polymers II*, **214** (2008) 151-169.
- [2] J. Shaya, P.R. Corridon, B. Al-Omari, A. Aoudi, A. Shunnar, M. I. H. Mohideen, A. Qurashi, B. Y. Michel, A. Burger, *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry reviews*, **52** (2022) 100529.
- [3] N. J. Jeon, H. Na, E. H. Jung, T.-Y. Yang, Y. G. Lee, G. Kim, H.-W. Shin, S. I. Seok, J. Lee, J. Seo, *Nature Energy*, **3** (2018) 682-689.

Wystąpienie ustne

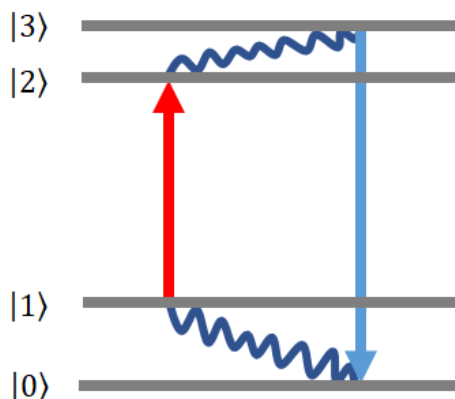
ANTY-STOKESOWSKIE CHŁODZENIE LASEROWE NANOKRYSTAŁÓW DOMIESZKOWANYCH JONAMI ZIEM RZADKICH

Kamil Bruchal, Paweł Karpiński, Dominika Wawrzyńczyk

Instytut Materiałów Zaawansowanych, 50-370 Wrocław, ul. Smoluchowskiego 23
e-mail: kamil.bruchal@pwr.edu.pl

Chłodzenie laserowe polega na obniżeniu temperatury układu fizycznego poprzez oświetlenie go wiązką lasera. Podczas gdy najbardziej znanym przykładem tego typu procesu pozostaje chłodzenie dopplerowskie pojedynczych atomów, mniej znane zjawisko chłodzenia anty-Stokesowskiego może zostać wykorzystane do chłodzenia ciał stałych. Chłodzenie anty-Stokesowskie polega na fononowej konwersji w górę absorbowanego fotonu. Energia termiczna zawarta w drganiach sieci krystalicznej jest następnie wypromieniowywana w postaci fotonów o wyższej energii, co skutkuje obniżeniem temperatury ciała stałego. Zjawisko to może znaleźć zastosowanie w konstrukcji urządzeń chłodzących w skali nanometrycznej, pozbawionych ruchomych elementów oraz niegenerujących wibracji mechanicznych [1] [2].

Realizacja chłodzenia anty-Stokesowskiego wymaga znalezienia materiału charakteryzującego się wysoką zewnętrzną wydajnością kwantową, wysoką wydajności fononowej konwersji w górę oraz pokrywaniem się widm absorpcji i emisji w szerokim zakresie spektralnym. Obiecującymi kandydatami do tego typu zastosowań są nanokryształy domieszkowane jonami ziem rzadkich, w szczególności jonami iterbu (Yb) [1] [2]. W ramach wystąpienia zaprezentowane zostaną wstępne wyniki badań nad chłodzeniem laserowym heksagonalnych nanokryształów $\beta\text{-NaYF}_4:\text{Yb}^{+3}$



Rysunek 1. Model czteropoziomowy chłodzenia anty-Stokesowskiego. Różnica energii δE pomiędzy fotonem absorbowanym a emitowanym jest unoszona z układu.

Literatura

- [1] G. Nemova, R. Kashyap, *Reports on Progress in Physics*, **Vol. 73** (2010), Issue 8.
- [2] D. Seletskiy, R. Epstein, R. M. Sheik-Bahae, *Reports on Progress in Physics*, **Vol. 79** (2016), Issue 9.

Plakat

PRZEWODZĄCE PROTONOWO BIAKOMPZOZYTY NA BAZIE IMIDAZOLU I SKROBII

**Paweł Ławniczak¹, Adam Mizera¹, Alina T. Dubis², K. Pogorzelec-Glaser^{1,3},
Iga Jankowska¹, Andrzej Łapiński¹**

¹Instytut Fizyki Molekularnej PAN, 60-179 Poznań, ul. Mariana Smoluchowskiego 17

²Uniwersytet w Białymstoku, 15-245 Białystok, ul. Konstatego Ciołkowskiego 1K

³Uniwersytet Ekonomiczny w Poznaniu, 61-875 Poznań, al. Niepodległości 10

e-mail: lawniczak@ifmpan.poznan.pl

Celuloza jest powszechnym i jednocześnie bardzo interesującym organicznym materiałem, który posiada szereg potencjalnych zastosowań aplikacyjnych, od sensorów do medycyny [1-3]. W ostatnich latach rozwijane są próby wykorzystania celulozy w tworzeniu nowych przewodników protonowych [4]. Jedną z możliwości jest potraktowanie celulozy jako szkieletu i połączenie jej z molekułami, zapewniającymi dobre właściwości przewodzące jak np. imidazol [5, 6]. Takie materiały osiągają wysokie wartości przewodności elektrycznej (nawet powyżej 0,1 S/m). Niestety niestabilność termiczna, wynikająca m.in. z istnienia wody w celulozie, stanowi poważną wadę tych materiałów.

W tym wystąpieniu przedstawione zostaną wyniki badań nowych związków, które mogą znaleźć zastosowanie jako elektrolity stałe, utworzone na bazie innego organicznego i łatwo dostępnego materiału – skrobi ziemniaczanej. W badanych materiałach, skrobia spełnia rolę szkieletu struktury a imidazol jest odpowiedzialny za zapewnienie pożądanych właściwości elektrycznych. W celu poprawienia właściwości mechanicznych oraz termicznych zastosowano dodatkowe związki (np. montmorylonit). Badane kompozyty charakteryzują się dobrą stabilnością termiczną do temperatury 420K, lepszą od tej obserwowanej dla materiałów bazujących na celulozie. Jednocześnie, protonowe przewodnictwo elektryczne osiąga wartość maksymalną $\sigma_{dc}=5 \cdot 10^{-2}$ S/m. Jest to wielkość porównywalna do tych osiągniętych w biokompozytach celulozy z imidazolem.

Literatura

- [1] R.J. Moon, A. Martini, J. Nairn, J. Simonsen, J. Youngblood *Chem. Soc. Rev.*, **40** (2011) 3941.
- [2] I. Siro, D. Plackett, *Cellulose* **17**, 459 (2010).
- [3] S. Ummartyotin, H. Manuspiya, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **41** (2015) 402.
- [4] B.R. Evans, H.M. O'Neill, V.P. Malyvanh, I. Lee, J. Woodward, *Biosensors and Bioelectronics*, **18** (2003) 917.
- [5] I. Smolarkiewicz, A. Rachocki, K. Pogorzelec-Glaser, R. Pankiewicz, P. Ławniczak, A. Łapiński, M. Jarek, J. Tritt-Goc, *Electrochimica Acta*, **155** (2015) 38.
- [6] Li Zhao, I. Smolarkiewicz, H.-H. Limbach, H. Breitzke, K. Pogorzelec-Glaser, R. Pankiewicz, J. Tritt-Goc, T. Gutmann, G. Buntkowsky, *Journal of Physical Chemistry C*, **120** (2016) 19574.

Plakat

WPLYW CIŚNIENIA HYDROSTATYCZNEGO NA WŁAŚCIWOŚCI ELEKTRYCZNE KOPOLIMERU PIROLO-CO-POLI(PIROL-3-KWAS KARBOKSYLOWY)

Adam Mizera¹, Sylwia Zięba¹, Michał Bielejewski¹, Paweł Ławniczak¹, Alina T. Dubis², Andrzej Łapiński¹

¹Instytut Fizyki Molekularnej PAN, 60-179 Poznań, ul. Smoluchowskiego 17

²Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, 15-245 Białystok, ul. Ciołkowskiego 1K
e-mail: adam.mizera@ifmpan.poznan.pl

Badania mające na celu znalezienie nowych układów organicznych o pożądanym właściwościach fizykochemicznych dla elektroniki są kluczowe w rozwoju gospodarczym krajów wysokorozwiniętych. W ostatnich latach duże zainteresowanie środowiska naukowego jest skierowane w stronę polimerowych materiałów przewodzących [1, 2]. Do znalezienia odpowiedzi na pytanie, czy dany związek organiczny mógłby być wykorzystany np. w optoelektronice, niezbędne jest poznanie jego właściwości elektrycznych oraz optycznych [3].

Obiektem naszych badań jest kopolimer przewodzący polipirolo-co-poli(kwas pirolo-3-karboksylowy) utworzony na bazie pirolu i kwasu pirolo-3-karboksylowego. Badania właściwości elektrycznych i optycznych zostały przeprowadzone z wykorzystaniem spektroskopii impedancyjnej oraz spektroskopii Ramana. W celu zbadania struktury molekularnej kopolimeru wykorzystano metodę ssNMR w ciele stałym. Ponadto przeprowadzone zostały badania właściwości przewodzących w funkcji ciśnienia w zakresie do 5,5 GPa.

Badania pokazały, że mechanizm przewodzenia w badanym kopolimerze jest związany z przeskokami nośników ładunku, takich jak polarony i bipolarony. Ponadto, dokonano analizy wpływu ciśnienia hydrostatycznego na rodzaj oraz ilość występujących nośników ładunku w badanym materiale organicznym.

Praca naukowa finansowana ze środków budżetowych na naukę w latach 2020-2023, jako projekt badawczy w ramach programu PRELUDIUM-18 Narodowego Centrum Nauki, nr. rej. 2019/35/N/ST5/03324. Stypendysta korzysta ze wsparcia finansowanego Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (FNP), Start 098.2022.

Literatura

- [1] S. Inal, J. Rivnay, A. O. Suii, G. G. Malliaras i I. McCulloch, *Acc. Chem. Res.*, **51** (2018) 1368-1376.
- [2] D. Ji, T. Li, W. Hu i H. Fuchs, *Adv. Mater.*, **31** (2019) 1806070.
- [3] J. Sworakowski, *Synth. Met.*, **235** (2018) 125-130.

Plakat

DEFEKTY GRAFENU TURBOSTRATYCZNEGO O HYBRYDYZACJI SP3 INDUKOWANE ZA POMOCĄ SONIKACJI ULTRADŹWIĘKOWEJ W WARSTWACH LANGMUIRA SCHAEFER'A

Karol Rytel¹, Małgorzata Widelička², Damian Łukawski¹, Filip Lisiecki², Kamil Kędziński¹

¹Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej, Politechnika Poznańska, 60-965 Poznań, ul. Piotrowo 3

²Instytut Fizyki Molekularnej, Polska Akademia Nauk, Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań, Poland

e-mail: karol.rytel@put.poznan.pl

Grafen przyciągnął szerokie zainteresowanie ze względu na jego niezwykle właściwości mechaniczne, elektryczne i cieplne, co czyni go obiecującym materiałem na tanie przezroczyste elektrody, urządzenia elektryczne lub skuteczną wzmacniającą warstwę w materiałach kompozytowych [1]. Podczas gdy większość zastosowań nie wykorzystuje bezpośrednio dyspersji grafenu, wiele z nich wymaga rozproszenia grafenu na pewnym etapie procesu, co może prowadzić do uszkodzenia materiału i pogorszenia właściwości elektrycznych [2]. Można wyróżnić trzy rodzaje defektów: krawędziowe, wakanse oraz defekty związane ze zmianą hybrydyzacji węgla z sp² na sp³ [3]. Proces sonikacji powinien być wystarczający, aby właściwie zdyspergować grafen, jednocześnie minimalnie inwazyjny, aby struktura płatków grafenowych nie została uszkodzona.

Dwie zawiesziny grafenu turbostratycznego (TG) były sonikowane przy dwóch ustawieniach mocy sonifikatora - 20 W i 60 W oraz przez różne okresy zmienne od 1 min do 180 min. Następnie cienkie warstwy TG były przygotowywane techniką Langmuira i przenoszone na podłoże z kwarcu za pomocą metody Langmuira-Schaffera. Cienkie warstwy były badane za pomocą pomiaru przewodnictwa elektrycznego, spektroskopii UV-VIS, spektroskopii Ramana i mikroskopii skaningowej. Stwierdziliśmy, że stosunek σ_{DC}/σ_{OP} (jakość optoelektroniczna elektrody przezroczystej) uzyskany dla cienkich warstw TG znacząco maleje wraz z czasem sonikacji, ze względu na znaczny spadek przewodnictwa elektrycznego, dla mocy 60 W. Z kolei w przypadku zastosowania mocy sonikacji 20 W nie zaobserwowano znaczących zmian parametru σ_{DC}/σ_{OP} . W wielu publikacjach jakość grafenu była analizowana za pomocą spektroskopii Ramana poprzez stosunek intensywności D/G, co udowadniamy, że może być niewystarczające do właściwego scharakteryzowania płatków grafenowych. W niniejszej pracy wykorzystaliśmy stosunek intensywności D/D', aby wyjaśnić zmiany w stosunku σ_{DC}/σ_{OP} . Wyniki spektroskopii Ramana wskazują, że to szczególne zachowanie zostało wyjaśnione poprzez wprowadzenie defektów hybrydyzacji sp³ do płatków TG podczas sonikacji o dużej mocy.

Plakat

MIGRACJA ENERGII W UKŁADACH O OGRANICZONEJ OBJĘTOŚCI – PORÓWNANIE PRZYBLIŻONYCH METOD ROZWIĄZYWANIA „MASTER EQUATION” ZA POMOCĄ FUNKCJI GREENA.

Agnieszka Schlichtholz¹, Leszek Kułak², Piotr Bojarski¹

¹¹ Uniwersytet Gdański, Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki, Ul. Wita Stwosza 57, 80-952 Gdańsk

² Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej,

ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk

e-mail: agnieszka.schlichtholz@phdstud.ug.edu.pl

Bezpromienista migracja energii pomiędzy identycznymi molekułami jest procesem wieloetapowym zachodzącym dzięki długozasięgowemu dipol-dipolowemu mechanizmowi oddziaływania międzymolekularnego. Migrację energii można wykryć doświadczalnie jedynie poprzez depolaryzację stężeniową światła fluorescencji, szczególnie zanik anizotropii emisji. Dzieje się tak, ponieważ wkład do zaniku anizotropii emisji dają tylko pierwotnie wzbudzone molekuły. W naszych badaniach skupiamy się na układach w nanoskali o ograniczonej objętości. Dla takich układów, których przykładami są nanostruktury typu rdzeń-otoczka, otrzymane zostały wyrażenia na zanik anizotropii emisji.

Matematyczny opis procesów stochastycznych zachodzących w przedstawionych układach uzyskuje się poprzez układ równań typu „master equation”. Ich rozwiązanie jest możliwe przy pomocy funkcji Greena. Do uzyskania wyrażen na funkcję Greena stosuje się różne metody przybliżone. W naszej pracy pokazujemy jak działają metoda przybliżenia Padè [1] oraz metoda diagramatyczna. [2] Rezultaty obu metod są porównywane z wynikami uzyskanymi z symulacji Monte-Carlo. Na podstawie tych porównań określone są granice stosowalności obu metod (w zależności od rozmiaru nanostruktury i ilości przyłączonych molekuł). Pokazane zostało, że metoda diagramatyczna jest znacznie bardziej uniwersalna niż przybliżenie Padè i daje dokładniejsze wyniki.

Literatura

[1] Kułak, L., Schlichtholz, A., & Bojarski, P. (2022). Nonradiative Energy Migration in Spherical Nanoparticles: Theoretical Model and Monte Carlo Study. *The Journal of Physical Chemistry C*, 126(27), 11209-11218.

[2] Kułak, L., Schlichtholz, A., & Bojarski, P : Multistep Excitation Migration on a Spherical Nanoparticle – manuscript under review

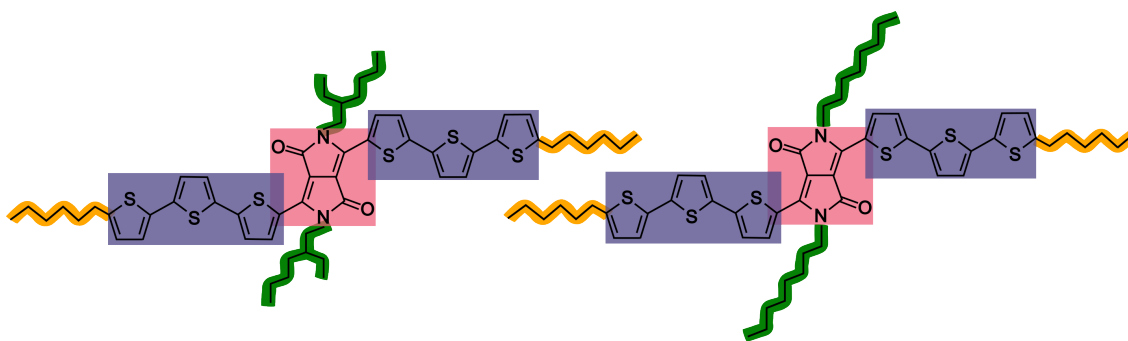
Plakat

WPLYW STRUKTURY PRZESTRZENNEJ ŁAŃCUCHÓW ALKILOWYCH NA WŁAŚCIWOŚCI DIKETOPIROLOPIROLI

Alicja Stachowiak, Kamil Kędzierski, Karol Rytel, Alina Dudkowiak

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej, Politechnika Poznańska, 60-965 Poznań, ul. Piotrowo 3
e-mail: alicja.k.stachowiak@doctorate.put.poznan.pl

Diketopirolopirole (DPP) to grupa organicznych barwników, o bardzo rozbudowanych możliwościach modyfikacji strukturalnych. Wspólnym elementem DPP jest ich rdzeń - π -sprzężony dilaktam. Celem niniejszych badań było określenie wpływu struktury przestrzennej bocznych łańcuchów alkilowych na organizację i właściwości cienkich warstw oligotiofenowych pochodnych DPP. Przeanalizowano, jak różnica geometrii podstawnika alkilowego w pozycji bocznej wpływa na aranżację molekuł na granicy faz woda-powietrze oraz na właściwości warstw barwników przeniesionych na podłoże stałe.



Struktura molekularna omawianych barwników.

W celu wytworzenia oraz zbadania cienkich warstw na granicy woda-powietrze wykorzystano technikę Langmuira, następnie przeniesiono je na podłoże stałe za pomocą techniki Langmuira-Schaefera. Dodatkowe informacje dotyczące struktury warstw Langmuira uzyskano poprzez badanie zmian potencjału powierzchniowego oraz zastosowanie mikroskopii kąta Brewstera (BAM). Dane eksperymentalne poddano analizie z wykorzystaniem wyników obliczeń teorii funkcjonału gęstości (DFT). Morfologię warstw Langmuira-Schaefera przeniesionych na podłoże kwarcowe zbadano za pomocą mikroskopii konfokalnej. Badania wsparto pomiarami spektroskopowymi. Wyniki badań wykazały znaczące różnice w przebiegach izoterm zarejestrowanych dla barwników podczas kompresji warstw Langmuira. W przypadku barwnika z rozgałęzionym bocznym łańcuchem alkilowym zaobserwowano przegięcie izoterm poniżej wartości 10 mN/m, które nie występuje dla barwnika z prostym łańcuchem. Analiza izoterm, wsparta wynikami obliczeń DFT, wskazała, że warstwy tworzone na granicy faz woda-powietrze nie składają się z monomerów, ale zbudowane są z zagregowanych (dimerycznych lub tetramerycznych) form barwników, a rozgałęzienie alkilu wpływa na kolejność etapów kompresji.

Wyniki potwierdziły, że nawet drobna zmiana w strukturze bocznych łańcuchów alkilowych badanych barwników determinuje ich właściwości termodynamiczne oraz organizację cienkiej warstwy. Połączenie technik eksperymentalnych i teoretycznych, w tym analizy momentu dipolowego umożliwiło dogłębne zrozumienie organizacji barwników DPP w cienkich warstwach. W rezultacie zaproponowano model ich ułożenia.

Plakat

AKTYWNE POWIERZCHNIOWO CIECZE JONOWE JAKO ZAMIENNIKI KONWENCJONALNYCH KATIONOWYCH SURFAKTANTÓW

**Marta Wojcieszak¹, Anna Syguda¹, Katarzyna Materna¹, Sylwia Zięba², Adam Mizera²,
Andrzej Łapiński²**

¹Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, ul. Berdychowo 4

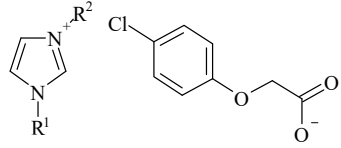
²Instytut Fizyki Molekularnej, Polska Akademia Nauk, ul. M. Smoluchowskiego 17

e-mail: marta.d.wojcieszak@doctorate.put.poznan.pl

Aktywne powierzchniowo ciecze jonowe (ang. *Surface-Active Ionic Liquids*, SAILs) są uważane za nową, dobrze prosperującą klasę cieczy jonowych (ang. *Ionic Liquids*, ILs). Pod względem struktury są to związki, które zawierają część hydrofilową, tzw. „głowę” oraz hydrofobowy „ogon”, zazwyczaj w postaci długiego podstawnika alkilowego. Dodatkowo ciecze jonowe o amfifilowej budowie zdolne są do agregacji w środowisku wodnym, tworząc samoorganizujące się micelle [1].

Niniejsza praca miała na celu analizę agregacji soli imidazoliowych (Tabela 1) w roztworze wodnym oraz szczegółowe określenie korelacji między budową wybranych związków a ich zdolnościami zwilżającymi.

Tabela 1. Ogólny wzór strukturalny badanych związków.



| Skrót | R ¹ | R ² |
|--------|--|--|
| SAIL-1 | C ₁₀ H ₂₁ | C ₁₀ H ₂₁ OCH ₂ |
| SAIL-2 | CH ₃ | C ₁₀ H ₂₁ OCH ₂ |
| SAIL-3 | C ₁₀ H ₂₁ OCH ₂ | C ₁₀ H ₂₁ OCH ₂ |
| SAIL-4 | CH ₃ | C ₁₀ H ₂₁ |
| SAIL-5 | C ₁₀ H ₂₁ OCH ₂ | C ₆ H ₁₃ SCH ₂ |

W celu określenia zdolności soli imidazoliowych do adsorpcji na granicy faz wyznaczono standardowe parametry, w tym np. krytyczne stężenie micelizacji (CMC) czy skuteczność obniżania napięcia powierzchniowego (pC₂₀). Uzyskane wyniki potwierdziły aktywność powierzchniową badanych cieczy jonowych na poziomie klasycznych jonowych surfaktantów.

Literatura

[1] C.S. Buettner, A. Cognigni, C. Schröder, K. Bica-Schröder, *Surface-active ionic liquids: a review*, J. Mol Liqs, 347, 2022, 1-31.

[2] M. Wojcieszak, A. Syguda, S. Zięba, A. Mizera, A. Łapiński, K. Materna, *Effect of surface-active ionic liquids structure on their synthesis, physicochemical properties, and potential use as crop protection agents*, J. Mol Liqs, 383, 2023, 1-10.

Badania zostały sfinansowane przez Ministerstwo Edukacji i Nauki

0912/SBAD/2309 oraz 0912/SBAD/2308.

Wykład zaproszony

WARSTWY LANGMUIRA NANOMATERIAŁÓW WĘGLOWYCH

Karol Rytel, Alicja Stachowiak, Kamil Kędziński

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej, Politechnika Poznańska, 60-965 Poznań, ul. Piotrowo 3
e-mail: karol.rytel@put.poznan.pl

Nanomateriały węglowe, takie jak nanorurki węglowe i grafen, odgrywają kluczową rolę w kontekście współczesnych technologii. Nanomateriały węglowe charakteryzują się unikalnym zestawem właściwości, w tym wyjątkową wytrzymałością mechaniczną, znakomitą przewodnością elektryczną i cieplną, a także zdolnością do formowania się w struktury o nanometrycznej grubości. Te wyjątkowe cechy sprawiają, że są one idealne do wykorzystania w szeregu zaawansowanych aplikacji technologicznych. W sektorze elektroniki, nanomateriały węglowe są często stosowane do budowy tranzystorów, umożliwiając kontynuację trendu miniaturyzacji. W obszarze energetyki, nanorurki węglowe i grafen mają znaczące zastosowanie w tworzeniu wydajnych superkondensatorów i baterii. Nanomateriały węglowe są także wykorzystywane do tworzenia kompozytów o wyjątkowo wysokiej wytrzymałości i niskiej gęstości. W świetle dzisiejszych realiów technologicznych, nanomateriały stały się absolutnie niezbędne do wytwarzania współczesnej technologii.

Wiele z wyżej wymienionych zastosowań nanomateriałów węglowych wymaga wytworzenia z nich wielkoskalowych warstwy. Istnieje wiele metod otrzymywania warstw nanomateriałów węglowych. Dobranie odpowiedniej metody ich wytwarzania najczęściej zależy od specyfiki zastosowania. Podczas wyboru odpowiedniej metody otrzymywania warstw należy zachować kompromis pomiędzy kosztami wytworzenia warstwy a jej ceną. Najlepszej jakości warstwy można uzyskać za pomocą chemicznej depozycji z fazy gazowej (CVD). Pomimo, że efekty tych procesów są spektakularne, to koszty związane z ich realizacją są znaczące. Z kolei techniki produkcji takie jak spin coating czy spray coating są stosowane w celu tworzenia warstw nanomateriałów węglowych, z racji na ich prostotę implementacji oraz korzystną perspektywę ekonomiczną. Niemniej jednak, procesy te nie zawsze są w stanie zapewnić satysfakcjonującą jakość otrzymanych warstw, co implikuje potencjalne ograniczenia w kontekście ich funkcjonalności w specyficznych zastosowaniach.

Metody Langmuira, oferują atrakcyjny kompromis pomiędzy tanimi a drogimi metodami otrzymywania warstw nanomateriałów węglowych zapewniając jednocześnie dobrą kontrolę nad strukturą warstwy. Zaletą tych metod jest możliwość precyzyjnej kontroli gęstości i struktury warstwy oraz otrzymywania uporządkowanych warstw o wysokiej anizotropii. Wykorzystanie technik Langmuira nie tylko umożliwia otrzymywanie warstw, ale również daje unikalną możliwość ich analizy, która obejmuje badanie struktury, morfologii, interakcji powierzchniowych oraz dynamiki procesów zachodzących na granicy faz. Metody Langmuira pozwalają więc na kompleksowe zrozumienie właściwości nanomateriałów węglowych, co jest kluczowe dla ich efektywnego wykorzystania w różnorodnych dziedzinach, takich jak nanotechnologia, materiałoznawstwo, elektronika, czy medycyna. W ramach niejszego wystąpienia omówione zostaną możliwości technik Langmuira w zakresie otrzymywania warstw nanomateriałów węglowych jak i ich zastosowania jako potężne narzędzie do badania ich właściwości fizykochemicznych.

Wystąpienie ustne

CMC W POWŁOKACH ELEKTROPRZEWODZĄCYCH Z NANOMATERIAŁAMI WĘGLOWYMI

Anna Martin, Damian Łukawski, Alina Dudkowiak

Zakład Fizyki Molekularnej, Instytut Fizyki, Politechnika Poznańska, ul. Piotrowo 3, 60-965 Poznań
e-mail: anna.martin@doctorate.put.poznan.pl

W ostatnich latach nanomateriały węglowe, takie jak nanorurki węglowe (ang. *carbon nanotubes* - CNT), umożliwiły wytwarzanie wielu nowych rodzajów cienkowarstwowych, elastycznych komponentów elektrycznych i elektronicznych, takich jak ścieżki przewodzące, tranzystory, czujniki, czy powierzchnie grzewcze [1, 2]. Powłoki elektroprzewodzące wykonuje się między innymi przez drukowanie, natryskiwanie lub powlekanie warstw CNT z wodnych zawiesin [3]. Ze względu na stabilność termiczną CNTs w wysokich temperaturach oraz ich hydrofobowość [4], można przypuszczać, że substancja dyspergująca odgrywa kluczową rolę w modyfikowaniu przewodnictwa powłok węglowych w obecności czynników środowiskowych. Niektóre powszechnie stosowane biopolimery stabilizujące wykazują mniejszą odporność na warunki środowiskowe, co wpływa na przewodnictwo elektryczne powłoki. Zmiany rezystancji powłok węglowych pod wpływem czynników zewnętrznych są wykorzystywane w urządzeniach monitorujących, np. w czujnikach wilgotności, nacisku czy temperatury. Jednym z biopolimerów wykorzystywanych do wodnych dyspersji CNT jest karboksylometyloceluloza sodu (ang. *sodium carboxymethylcellulose* – CMC), która jest pochodną jednego z najliczniej występującego biopolimeru w naturze – celulozy. Oprócz właściwości dyspergujących cechuje się właściwościami higroskopijnymi, wykorzystywanymi do zagęszczania oraz stabilizacji wykonanych zawiesin [5].

Praca prezentuje wyniki badań dotyczących powłok elektroprzewodzących zawierających CNT i CMC. W celu uzyskania cienkich warstw, zawiesinę rozproszono na podłożu celulozowym przy użyciu aplikatora automatycznego farb, osiągając grubość mokrej warstwy wynoszącą 107 μm . Przez przeprowadzenie badań elektrycznych, ustalono próg perkolacji w kompozycie CNT/CMC na powierzchni celulozowej. Przy użyciu pomiaru kąta zwilżania, wykonanego za pomocą metody siedzącej kropli, przeanalizowano właściwości hydrofilowe powłok w zależności od stężenia CNT w osnowie polimerowej. Dodatkowo, zbadano rezystancję powłok węglowych w warunkach różnej wilgotności względnej powietrza oraz określono ich stabilność i powtarzalność pod kątem potencjalnego zastosowania jako elastyczne sensory wilgotności powietrza. Badania nad kompozytami CMC/SLS otwierają perspektywy dla taniej i skalowalnej produkcji elektroniki na różnych materiałach i powierzchniach.

A. Martin dziękuje Ministerstwu Nauki i Szkolnictwa Wyższego (0512/SBAD/2320) za finansowanie badań. D. Łukawski dziękuje Narodowemu Centrum Badań i Rozwoju (TANGO-IV-A/0014/2019-00) za finansowanie badań.

Literatura

- [1] M. Słoma, *Nanomateriały węglowe w technologii elektroniki drukowanej*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa, 2017.
- [2] D. Janas, K. K. Koziol, *Carbon*, **59** (2013) 457–463.
- [3] D. Łukawski, A. Dudkowiak, D. Janczak, A. Łekawa-Raus, *Compos Part A Appl Sci Manuf* **127** (2019).
- [4] B. Koh, W. Cheng, *Langmuir* **30** (2014) 10899–10909
- [5] N. Minami, Y. Kim, K. Miyashita, S. Kazaoui, B. Nalini, *Appl Phys Lett* **88** (2006).

Wystąpienie ustne

WARSTWY LANGMUIRA I LANGMUIRA-SCHAEFERA NANORUREK WĘGLOWYCH

Adam Mylkie, Kamil Kędzierski

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej, 60-965 Poznań, ul. Piotrowo 3
e-mail: adam.mylkie@student.put.poznan.pl, kamil.kedzierski@put.poznan.pl

Warstwy Langmuira to cienkie warstwy wytwarzane na granicy faz woda-powietrze. Początkowo do wytwarzania tych warstw wykorzystywano cząsteczki amfifilowe, które charakteryzują się tym, że w swojej budowie posiadają część hydrofilową oraz hydrofobową, jednak od wielu lat wykorzystuje się do tego również m.in. nanocząstki. Uzyskane warstwy z granicy faz można nanosić na podłoża stałe metodą wertykalną (Langmuira-Blodgett) bądź horyzontalną (Langmuira-Schaefera)^[1].

Cienkie warstwy nanorurek węglowych (CNTs) uzyskiwane techniką Langmuira stanowią interesujący obiekt badawczy ze względu na ich własności fizyczne. Charakteryzują się one wysoką wartością przewodnictwa elektrycznego oraz unikalnymi właściwościami mechanicznymi. Ponadto, interesującym aspektem jest ich przewodność termiczna^[2]. Cechą charakterystyczną cienkich warstw CNTs jest wartość transmitancji światła widzialnego powyżej 80% co umożliwia zastosowanie ich w urządzeniach transparentnych takich jak przezroczyste elektrody czy podłoża w przezroczystych czujnikach.^[3]

Sz szczególnie interesującym aspektem jest zastosowanie ich w transparentnych czujnikach wilgotności. W wyniku działania higroskopijnego polimeru, który zostaje naniesiony na cienką warstwę nanorurek węglowych zmiana ulega rezystancja co umożliwia rejestrację wilgotności powietrza^[4].

Podczas badań wykorzystano komercyjne wielościennie nanorurki węglowe o średnicy 9nm i długości 5µm. Uzyskano ich zawiesinę w dichlorometanie, za pomocą homogenizacji ultradźwiękowej. Następnie zawiesinę naniesiono na wannę Langmuira oraz uzyskano cienką warstwę na powierzchni wody, którą naniesiono na podłożu szklane metodą Langmuira-Schaefera. Następnie zarejestrowano widma absorpcji światła w zakresie widzialnym oraz wyznaczono charakterystyki prądowo-napięciowe w celu zbadania właściwości uzyskanej warstwy oraz przetestowaniu jej użyteczności w transparentnym czujniku wilgotności.

Literatura

- [1] V. J.R. Oliveiraa, E.A. Silvaa, C.A. Olivatia, *Molecular Organization of Functionalized Carbon Nanotube at the Water-Air Interface and in Solid Thin Film*, „Materials Research”, **14** (2021), s.1-3
- [2] Q. Cao, J.A. Rogers, *Ultrathin Films of Single-Walled Carbon Nanotubes for Electronics and Sensors: A Review of Fundamental and Applied Aspects*, „Advanced Materials”, **29** (2019),s.35-40
- [3] K.Rytel, K.Kędzierski, B.Barszcz, *The influence of diameter of multiwalled carbon nanotubes on mechanical, optical and electrical properties of Langmuir-Schaefer films*, „Physical Chemistry Chemical Physics”, **39** (2020), s.6
- [4] J.M Tulliani, B. Inserra, D. Ziegler, *Carbon-Based Materials for Humidity Sensing: A Short Review*, „Micromachines”, **10** (2019) s.1-6

Wystąpienie ustne

CIENKIE WARSTWY POLIMERU ALKOHOLU WINYLOWEGO JAKO MATERIAŁ AKTYWNY W DETEKTORACH WILGOTNOŚCI POWIETRZA

Agnieszka Grundt, Kamil Kędzierski

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej, 60-965 Poznań, ul. Piotrowo 3
e-mail: agnieszka.grundt@student.put.poznan.pl

Rezystancyjne czujniki wilgotności są szeroko stosowane w przemyśle szczególnie w instalacjach wentylacji i klimatyzacji HVAC/BEMS, komorach klimatycznych, w suszarniach np. do ceramiki czy materiałów sypkich, a także w zakładach farmaceutycznych i spożywczych. [1] Idea tych czujników polega głównie na tym, że poprzez zastosowanie cienkich warstw dążymy do miniaturyzacji sensorów, a więc ich grubość jest bardzo niska. Detektory mogą być transparentne, bądź też elastyczne co może pozwolić na montowanie ich np. na oknach czy wyświetlaczach, a być może w przyszłości na ludzkiej skórze. [2] Miniaturyzacja prowadzi też do zmniejszenia kosztów oraz możliwości seryjnego produkowania sensorów.

Wykorzystanie polimerów higroskopijnych w sensorach pozwala na jej rejestrację wilgotności na podstawie ich zmian fizycznych tj. zmiana objętości bądź masy lub zmian właściwości elektrycznych. Ich elastyczność oraz dostępność sprawiają, że charakteryzują się one wysokim potencjałem aplikacyjnym. [3] Zasada działania takich sensorów polega na zmianie objętości polimeru, w przypadku prezentowanych wyników polimeru alkoholu winylowego pod wpływem wilgotności. Zmiany te oddziałują na cienką warstwę materiału przewodzącego, przez co dochodzi do zmiany oporu elektrycznego. Powyżej opisane warstwy wytworzone są na elektrodzie grzebieniowej umożliwiającą pomiar oporu elektrycznego. [3]

PVA jest szeroko stosowanym bezbarwnym polimerem, który cechuje się transparentnością oraz biodegradowalnością. Wykorzystywany jest on w wielu dziedzinach. [4] Zaprezentowane zostaną wyniki badań w których cienka warstwa PVA stosowana jest jako warstwa aktywna w detektorze wilgotności powietrza. Powłoka ta została wykonana za pomocą powlekania obrotowego (Spin-coating). Substancją powlekającą jest roztwór polimeru alkoholu winylowego z rozpuszczalnikiem oraz dodatkiem barwnika fluorescencyjnego. Metoda Spin-coating została zastosowana ze względu na to że pozwala ona na wykonanie powtarzalnych, dobrze zorganizowanych filmów o płaskiej powierzchni oraz kontrolowanej grubości. [2] W celu określenia jakości uzyskanych warstw zastosowano znacznik fluorescencyjny umożliwiający obrazowania wykorzystanie mikroskopii fluorescencyjnej Uzyskane warstwy zostały także zbadane za pomocą spektroskopii absorpcyjnej oraz emisyjnej.

Literatura

- [1] T. Delipinar, A. Shafique, M.Gohar, M.Yapici, *Fabrication and Materials Integration of Flexible Humidity Sensors for Emerging Applications, Asc Omega*, **6** (2021), s.8744-8753
- [2] J. Moreira, C. Vale, N.M. Alves, *Spin-coated freestanding films for biomedical applications, Journal of Materials Chemistry B*, **9** (2021), s. 3778-3795
- [3] J.M. Tulliani, B.Inserra, D.Ziegler, *Carbon-Based Materials for Humidity Sensing:A Short Review, Micromachines* (2019), s. 1-3
- [4] K. Lazarova, S. Bozhilova, S. Ivanova, D. Christova, T. Babeva. *Flexible and transparent polymerbased optical humidity sensor, Sensors*, **21** (2021), s. 3674

ELEKTROPRZĘDZONE WŁÓKNA FLUORESCENCYJNE DO STOSOWANIA W TECHNICIE OŚWIETLENIOWEJ

mgr inż. Marharyta Hancharova, dr inż. Dorota Zająć, prof. Joanna Cabaj, prof. Lech Sznitko

Instytut Materiałów Zaawansowanych 50-370 Wrocław, wyb. Wyspiańskiego 27
e-mail: marharyta.hancharova@pwr.edu.pl

Metoda elektroprzędzenia (EP) jest niezwykle użytecznym sposobem do wytwarzania włókien w mikro- i nanoskali, a jednocześnie jest dostatecznie prosta i tania w użyciu. Włókna, wytwarzane tą techniką, znalazły swoje zastosowanie w rozpoznawaniu molekularnym [1], czujnikach [2], półprzewodnikach luminescencyjnych [3], do immobilizacji enzymów [4], w inżynierii tkankowej [5], filtracji [6] i w wielu innych obszarach.

EP umożliwia poprawę właściwości fizykochemicznych włókien poprzez modyfikację powierzchni wytwarzanych materiałów (wykonanie elektroprzędzonych membran) i funkcjonalizację, np. za pomocą związków nieorganicznych (jony metali [7], lantanowce [8]), organicznych (barwniki luminescencyjne [9], polimery π -sprzężone) lub przez domieszkowanie polimerów komercyjnych.

Bardzo obiecującymi systemami, z których uzyskuje się polimery do elektroprzędzenia, są związki heterocykliczne [10], a przede wszystkim te, które zawierają difenylaminę [11], selenofen [12], karbazol [13], tiofen [14] i tiazol [15]. Ich użycie jest niezmiernie ważne, ponieważ takie związki już są szeroko stosowane w technice oświetleniowej jako półprzewodniki organiczne [16-17].

W swojej prezentacji chciałabym przedstawić technikę EP jako sposób wytwarzania włókien fluorescencyjnych z domieszkowaniem półprzewodników organicznych oraz własne dotychczasowe wyniki.

Literatura

- [1] J.D. Lee i wsp., *Organic Letters* **7** (2005) 963.
- [2] J. M. Bedlek-Anslow i wsp., *Langmuir* **16** (2000) 9137.
- [3] B. S. Li i wsp., *Macromolecules* **39** (2006) 456.
- [4] D. N. Tran i wsp., *Topics in Catalysis* **55** (2012) 1057.
- [5] T. Dvir i wsp., *Nature Nanotechnology* **6** (2011) 13.
- [6] R. S. Barhate i wsp., *Journal of Membrane Science* **296** (2007) 1.
- [7] Q. Chen i wsp., *Polymer Journal* **39** (2007) 568.
- [8] J. Bai i wsp., *Materials Chemistry and Physics* **217** (2018) 486.
- [9] L. Pang i wsp., *Polymers* **11** (2019) 986.
- [10] S. M. Amininasab i wsp., *High Performance Polymers* **32** (2020) 371.
- [11] K. Manesh i wsp., *IEEE Transactions on Nanotechnology* **6** (2007) 513.
- [12] X. Liu i wsp., *Materials* **15** (2022) 7883.
- [13] M. Mondragon i wsp., *Organic Electronics* **15** (2014) 2993.
- [14] K. Chan i wsp., *Synthetic Metals* **160** (2010) 2587.
- [15] K. Mahesh i wsp. *Sensors and Actuators B* **251** (2017) 9.
- [16] S. Sundarajan i wsp., *Materials Letters* **64** (2010) 2369.
- [17] M. Hancharova i wsp. *Journal of Polymer Research* **29** (2022) 417.

Wystąpienie ustne

BADANIA WARSTW KRYSTALICZNYCH PEROWSKITÓW I GRANATÓW OTRZYMANÝCH METODĄ EPITAKSJI Z FAZY CIEKŁEJ

Piotr Radomski¹, Wioletta Dewo¹, Vitaliy Gorbenko², Yuriy Zorenko², Tomasz Runka¹

¹Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej, Instytut Badań Materiałowych i Inżynierii Kwantowej,
Politechnika Poznańska, 60-965 Poznań, Piotrowo 3

²Instytut Fizyki, Uniwersytet Kazimierza Wielkiego, 85-990 Bydgoszcz, Powstańców Wielkopolskich 2
e-mail: piotr.radomski@student.put.poznan.pl

Ze względu na korzystne właściwości optyczne duże zainteresowanie wywołują krystaliczne warstwy (SCFs – single crystalline films) perowskitów YAlO_3 [1], $\text{TbAlO}_3\text{:Mn}$ [2], $\text{Gd}_{0,6}\text{Lu}_{0,4}\text{AlO}_3\text{:Eu}^{3+}$ oraz granatów $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}\text{:Ce}^{3+}$ [3], $\text{Tb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}\text{:Mn}^{2+}$ [4]. Wzrost SCFs został przeprowadzony za pomocą metody epitaksji z fazy ciekłej (LPE – liquid phase epitaxy). Metoda LPE wymaga użycia krystalicznego podłoża, na którym wzrasta warstwa krystaliczna materiału. Zapostulowana i potwierdzona została koncepcja dotycząca istnienia warstwy przejściowej pomiędzy substratem a wzrastającą warstwą. W celach badawczych zastosowane zostały techniki dyfrakcji rentgenowskiej (XRD – X-ray diffraction), spektroskopii Ramana oraz spektroskopii wysokorozdzielczej luminescencji. Dla YAlO_3 dodatkowo przeprowadzono obliczenia teoretyczne w reżimie periodycznych warunków brzegowych, wykorzystując metodę pola samouzgodnionego (self consistent field) Hartree’go – Fock’a oraz Kohn’a -Sham’a zaimplementowaną w oprogramowaniu CRYSTAL17. Porównane zostały różne przybliżenia korelacji wymiennych, co pozwoliło wybrać funkcjonal dający wyniki najbardziej zbliżone do doświadczalnych.

Materiały o strukturze perowskitu lub granatu domieszkowane jonami ziem rzadkich wykazują skłonności do fotokonwersji i scyntylacji, z tego powodu wykorzystuje się je w budowie detektorów promieniowania jonizującego, diod elektroluminescencyjnych oraz paneli fotowoltaicznych. Fotokonwersyjne właściwości warstwy granatu $\text{Tb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ domieszkowanego jonami Mn^{2+} zostały zbadane w funkcji grubości warstwy oraz zawartości aktywatora.

Pracę współfinansowano w ramach projektu 0511/SBAD/2351

Literatura

- [1] W. Dewo, K. Łuczyńska, Y. Zorenko, V. Gorbenko, K. Druźbicki, T. Runka, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **231** (2020) 118111.
- [2] W. Dewo, V. Gorbenko, Y. Syrotych, Y. Zorenko, T. Runka, *The Journal of Physical Chemistry C* **125** (2021) 16279.
- [3] W. Dewo, V. Gorbenko, Y. Zorenko, T. Runka, *Optical Materials: X* **3** (2019) 100029.
- [4] W. Dewo, V. Gorbenko, A. Markovskiy, Y. Zorenko, T. Runka, *Journal of Luminescence* **254** (2023) 119481.

Wystąpienie ustne

WYKORZYSTANIE ROZPRASZANIA ŚWIATŁA W STEROWANIU WZMOCNIENIEM ŚWIATŁA

Jastin E. Popławski, Konrad Cyprych

Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Soft Matter Optics Group,
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław
e-mail: jastinp@proton.me

Zjawisko wielokrotnego rozpraszania światła jest podstawą działania laserowania randomicznego, w którym akcja laserowa jest generowana z losowych rezonatorów optycznych przy zewnętrznym wzbudzeniu. Poprzez modyfikowanie właściwości optycznych układów hybrydowych składających się z domieszkowanej barwnikiem laserowym matrycy polimerowej ze zdyspergowanymi w niej szklanymi mikrosferami uzyskano wpływ nad generacją akcji laserowej. Badania eksperymentalne zestawiono z sytuacjami z wykorzystaniem modelu reakcyjno-dyfuzyjnego, który posłużył do losowania struktur o analogii strukturalnej do układów zdyspergowanych mikrosfer uzyskanych eksperymentalnie. Niemieszalne fazy, które przy separacji tworzą ustrukturyzowane wzory poddano symulacjom propagacji światła metodami numerycznymi.

Literatura

- [1] Sznitko, L., Mysliwiec, J. and Miniewicz, A. The role of polymers in random lasing. *J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys.* **2015**, 53: 951-974.
- [2] Cyprych, K.; Sznitko, L. Tailoring the Random Lasing Properties by Controlled Phase Separation Process in PMMA:PVK Dye-Doped Polymeric Blends. *Polymers* **2021**, 13, 3182.

Wystąpienie ustne

MECHANIZMU TRANSPORTU PROTONU W ORTOFTALANIE IMIDAZOLIOWYM ZAWIERAJĄCYM W STRUKTURZE HELIKALNĄ SIĘĆ WIĄZAŃ WODOROWYCH

**Sylwia Zięba¹, Adam Mizera¹, Paweł Ławniczak¹, Michał Bielejewski¹, Andrzej Gzella², Alina T. Dubis³,
Andrzej Łapiński¹**

¹Institut Fizyki Molekularnej PAN, 60-179 Poznań, ul. M. Smoluchowskiego 17

²Uniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego, 60-780 Poznań, ul. Grunwaldzka 6

³Uniwersytet w Białymstoku, 15-245 Białystok, ul. Ciołkowskiego 1K

e-mail: sylwia.zieba@ifmpan.poznan.pl

Dyfuzję protonu w przewodnikach jonowych możemy opisać mechanizmem nośnikowym, przeskokowym lub Grotthussa [1]. W mechanizmie Grotthussa, aby możliwy był dalekozasięgowy transport protonu powinna występować tzw. dynamiczna sieć wiązań wodorowych. W takiej sytuacji wiązania wodorowe powinny być średniej lub słabej mocy [1, 2], co umożliwiałoby ich zerwanie, reorientację cząsteczki z protonem oraz ponowne utworzenie wiązania wodorowego. W solach imidazoliowych powyższe warunki są spełnione i proces dyfuzji protonu odbywa się wg mechanizmu Grotthussa [1].

Badany w tej pracy ortoftalan imidazoliowy krystalizuje w układzie rombowym, w grupie przestrzennej $Fdd2$ [3]. Parametry komórki elementarnej są następujące: $a=47,177(2)$ Å, $b=22,9080(9)$ Å, $c=3,78426(16)$ Å, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, $V=4089,7(3)$ Å³. Jony w strukturze krystalicznej połączone są klasycznymi wiązaniami wodorowymi $N1b^+-H1b\cdots O8a^-$ oraz $N2b^+-H2b\cdots O11a^-$, tworząc strukturę helikalną wzdłuż kierunku [001] o motywie $C_2^2(12)\vec{a}\vec{b}$ łańcuchowych wiązań wodorowych.

Metodami chemii kwantowej przeprowadzono analizę możliwych ścieżek przewodzenia protonów w kryształach. W obliczeniach teoretycznych jony obracano wokół osi obrotu, a protony w mostkach wodorowych $N^+-H\cdots O^-$ przemieszczano wzdłuż wiązania. Wyznaczono energie aktywacji związane z przeskokiem protonu w mostku wodorowym oraz rotacją jonów imidazoliowego i ftalowego wokół osi symetrii o kąt 180° . Wyniki teoretyczne porównano z wyznaczoną eksperymentalnie, metodą spektroskopii impedancyjnej, energią aktywacji. Ponadto przeprowadzono w funkcji temperatury badania NMR wysokiej zdolności rozdzielczej ortoftalanu imidazoliowego.

Badania eksperymentalne i teoretyczne wskazują, że w ortoftalanie imidazoliowym, zawierającym w strukturze helikalną sieć wiązań wodorowych, transport protonu odbywa się wg mechanizmu Grotthussa.

Praca naukowa finansowana ze środków budżetowych na naukę w latach 2020-2023, jako projekt badawczy w ramach programu PRELUDIUM-18 Narodowego Centrum Nauki, nr. rej. 2019/35/N/ST5/03324. Stypendysta korzysta ze wsparcia finansowanego Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (FNP), Start 098.2022.

Literatura

[1] K.D. Kreuer, A. Fuchs, M. Ise, M. Spaeth, J. Maier *Electrochimica Acta* **43** (1998) 1281.

[2] M. Widelicka, K. Pogorzelec-Glaser, A. Pietraszko, P. Ławniczak, R. Pankiewicz, A. Łapiński, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** (2017) 25653.

[3] S. Zięba, A. Dubis, P. Ławniczak, A. Gzella, K. Pogorzelec-Glaser, A. Łapiński, *Electrochim. Acta* **306** (2019) 575.

Wykład zaproszony

CIAŁOSTAŁOWE PRZEWODNIKI PROTONOWE I ICH WŁAŚCIWOŚCI ELEKTRYCZNE

Paweł Lawniczak¹, Antoni Pawłowski¹, Sylwia Zięba¹, Alina Dubis², Andrzej Gzella³, Bożena Hilczer¹, Andrzej Łapiński¹

¹Instytut Fizyki Molekularnej PAN, 60-179 Poznań, ul. Mariana Smoluchowskiego 17

²Uniwersytet w Białymstoku, 15-245 Białystok, ul. Konstantego Ciołkowskiego 1K

³Uniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego, 61-701 Poznań, ul. Fredry 10

e-mail: lawniczak@ifmpan.poznan.pl

Otoczającą nas materię możemy podzielić stosując wiele różnych kryteriów. W szkole podstawowej uczymy się o podstawowym podziale, związanym z różnym stanem skupienia materii. Innym podziałem może być wyróżnienie i podział według charakterystycznych właściwości. Na przykład, biorąc pod uwagę zjawisko transportu nośnika ładunku elektrycznego przez materię, wyróżniamy materiały dobrze przewodzące i źle (dielektryki). Idąc dalej, możemy wprowadzić podział przewodników elektrycznych ze względu na nośnik ładunku, na metale, półprzewodniki oraz przewodniki jonowe. Te ostatnie można oczywiście podzielić ze względu na rodzaj jonu, który w nich jest nośnikiem ładunku. Tym sposobem dochodzimy do tytułowych przewodników protonowych, w których odpowiedzialne za przenoszenie ładunku są protony.

Przewodniki protonowe to bardzo interesująca grupa materiałów, która obecnie znajduje się w centrum zainteresowania wielu grup naukowych ze względu na możliwości aplikacyjne, zwłaszcza w nowych technologiach dotyczących alternatywnych źródeł energii elektrycznej. Związane jest to z koniecznością odejścia od kopalnych źródeł energii oraz zastąpienia ich technologiami przyjaznemu środowisku naturalnemu. Przewodniki protonowe znajdują zastosowanie w takich urządzeniach jak ogniwa paliwowe przewodzące protonowo [1-3] bądź elektrolizery wody [4].

W niniejszym wystąpieniu przedstawione zostaną przewodniki protonowe, które potencjalnie mogą znaleźć zastosowanie w niskotemperaturowych ogniwach paliwowych. W związku z tym, maksymalna wartość przewodności elektrycznej powinna być obserwowana do temperatury poniżej 200°C. Omówione zostaną dwie grupy materiałów.

Pierwszą grupę materiałów stanowią przewodniki superprotonowe. Są to związki, w których obserwuje się strukturalną przemianę fazową, której towarzyszy skokowy wzrost, nawet o kilka rzędów wielkości, przewodności elektrycznej [5]. Pokazany zostanie wpływ ciśnienia hydrostatycznego na właściwości elektryczne [6]. Zastosowanie skalowania widm przewodności elektrycznej, zgodnie z metodą zaproponowaną przez Summerfielda [7], posłuży do dyskusji na temat mikroskopowych zmian we właściwościach elektrycznych [6,8,9].

Drugą grupą materiałów są organiczne przewodniki protonowe, które bazują na połączeniu organicznych kwasów z molekułami heterocyklicznymi. W takich układach zadaniem kwasu jest tworzenie szkieletu struktury natomiast molekuł heterocyklicznych jest dostarczenie oraz udział w przenoszeniu ładunku. Ich rola jest podobna do roli molekuł wody, która występuje w komercyjnie dostępnym polimerze, Nafionie [10,11]. Ten układ ma wiele zalet, jednak ograniczenia wynikające z temperatury wrzenia wody oraz powiązane z tym problemy z odpowiednio wydajną pracą elektrod spowodowało poszukiwania alternatyw dla molekuł wody. Jedną z takich alternatyw są molekuły heterocykliczne, szczególnie te zawierające azot w pierścieniu jak imidazol [12,13]. Przedstawione zostaną wyniki uzyskane dla różnych kwasów połączonych z imidazolem: kwasami dikarboksyłowymi [14,15] oraz trikarboksylowymi [16,17]. Umożliwi to przedstawienie znaczących różnic we właściwościach elektrycznych. W układach z kwasami dikarboksyłowymi obserwuje się liniowy wzrost przewodności elektrycznej, zgodnie z równaniem Arrheniusa. Związki z kwasami trikarboksylowymi przedstawiają natomiast inne, odbiegające charakterystyki temperaturowe przewodności elektrycznej [16,17].

W wystąpieniu szczególna uwaga zostanie położona na właściwości elektryczne badanych materiałów. Do poznania tych właściwości korzysta się z pomiarów metodą spektroskopii impedancyjnej. Umożliwia ona poznanie makroskopowych parametrów badanych próbek (np. takich jak przewodność elektryczna

stałoprądowa) jak również rozpoznanie właściwości mikroskopowych (np. udział krystalitów i obszarów międzyziarnowych przy badaniu próbek polikrystalicznych). Zastosowanie pomiarów w szerokim zakresie częstotliwości i temperatur pozwala na otrzymanie wielu cennych informacji, zarówno z punktu widzenia badań podstawowych jak i aplikacyjnych.

Literatura

- [1] P. Colomban, *Solid State Ionics* **334**(2019) 125.
- [2] H. Steininger, M. Schuster, K.D. Kreuer, A. Kaltbeitzel, B. Bingöl, W. H. Meyer, S. Schauff, G. Brunklaus, J. Maier H.W. Spiess *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **9** (2007) 1764
- [3] P. Ramaswamy, N.E. Wong and G.K.H. Shimizu *Chem. Soc. Rev* **43** (2014) 5913.
- [4] Y. Meng, J. Gao, Z. Zhao, J. Amoroso, J. Tong, K.S. Brinkman, *Journal of Materials Science* **54** (2019) 9291.
- [5] S.M Haile, D.A Boysen, C.RI Chisholm, R.B Merle *Science* **410** (2001) 910.
- [6] P. Ławniczak, M. Zdanowska-Frączek, Ł. Lindner, A. Pawłowski, *PhysChemChemPhys* **21** (2019) 6051.
- [7] S. Summerfield, *Philos. Mag. A.* **52** (1985) 9
- [8] P. Ławniczak, A. Pawłowski, Cz. Pawlaczyk, *J Phys Condens Matter* **31** (2019) 375401.
- [9] A. Rachocki, K. Pogorzelec-Glaser, P. Ławniczak, M. Pugaczowa-Michalska, A. Łapiński, B. Hilczer, M. Matczak, A. Pietraszko *Crystal Growth&Design* **14** (2014) 1211.
- [10] K.D. Kreuer, *Journal of Membrane Science* **185** (2001) 35.
- [11] M.B. Karimi, F. Mohammadi, K. Hooshyari *Internation Journal of Hydrogen Science* **44** (2019) 28919.
- [12] K.D. Kreuer, A. Fuchs, M. Ise, M. Spaeth, J. Maier, *Electrochim. Acta* **43** (1998) 1281.
- [13] J.C. MacDonald, P.C. Dorrestein, M.M. Pilley, *Crystal Growth & Design* **1** (2001) 29.
- [14] P. Ławniczak, K. Pogorzelec-Glaser, A. Pietraszko, B. Hilczer, *Solid State Ionics* **306** (2017) 25.
- [15] P. Ławniczak, K. Pogorzelec-Glaser, A. Pietraszko, B. Hilczer, *Acta Crystallogr. B* **77** (2021) 31.
- [16] S. Zięba, A. Dubis, P. Ławniczak, A. Gzella, K. Pogorzelec-Glaser, A. Łapiński *Electrochim. Acta*, **306** (2019) 575.
- [17] S. Zięba, A. Piotrowska, A. Mizera, P. Ławniczak, K. Markiewicz, A. Gzella, A. Dubis, A. Łapiński *Molecules*, **26** (2021) 4657.

Wystąpienie ustne

TRANSPARENTNE ELEKTRODY Z TLENKU CYNY INDU O DEDYKOWANEJ GEOMETRII WYTWARZANE W PROCESIE WYTRAWIANIA CHEMICZNEGO

Michał Szczęsny, Kamil Kędzierski

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej, 60-965 Poznań, ul. Piotrowo 3
e-mail: michal.szczesny@student.put.poznan.pl

Pomiar wilgotności jest niezwykle istotny w przemyśle, odpowiada za trwałość i jakość leków w farmacji, prawidłowe wytwarzanie elementów elektronicznych, kontrolę upraw w rolnictwie i utrzymanie technologii UVAC w odpowiedniej kondycji by zapewnić optymalne warunki pracy i magazynowania. Usprawnienie technologii pomiaru wilgotności jest istotne dla rozwoju wielu dziedzin przemysłu. Obecnie badania skupiają się na zastąpieniu elektrod metalicznych transparentnymi. Głównymi elementami transparentnego czujnika wilgotności są: transparentna elektroda wytworzona na przezroczystym podłożu, cienka warstwa materiału przewodzącego oraz warstwa materiału higroskopijnego, absorbującego wodę.

W tworzeniu transparentnych elektrod wykorzystywane są głównie tlenki przewodzące, z których najkorzystniejszymi parametrami charakteryzuje się tlenek cyny indu (ITO). Innymi materiałami o dużym potencjale zastosowania w transparentnych czujnikach są: cienkie warstwy srebra i elektrody grafenowe, jednak cechują się one wysoką ceną, stosunkowo niską trwałością w warunkach środowiskowych lub bardzo skomplikowany procesem produkcji [3].

Zaprezentowane zostaną wyniki badań nad wytworzeniem transparentnej elektrody „grzebieniowej” ITO metodą wytrawiania chemicznego. W celu uzyskania elektrod o dedykowanej geometrii zastosowano komercyjne warstwy ITO wytworzone na podłożach szklanych, które pokryto polimerową warstwą odporną chemicznie. Maskę o dedykowanej geometrii wytwarzoną z pomocą plotera laserowego, wytrawiono w roztworze kwasu chlorowodorowego w celu pozbycia się zbędnej warstwy przewodzącej i uzyskania właściwej elektrody [4].

Literatura

- [1] H. Farahani, R. Wagiran, M. N. Hamidon. "Humidity sensors principle, mechanism, and fabrication technologies: a comprehensive review." *Sensors* 14.5 (2014): 7881-7939.
- [2] K. Lazarova, S. Bozhilova, S. Ivanova, D. Christova, & T. Babeva. Flexible and transparent polymer-based optical humidity sensor. *Sensors*, 21.11 (2021), 3674.
- [3] Villarreal, Claudia C., et al. "Graphene compared to fluorine-doped tin oxide as transparent conductor in ZnO dye-sensitized solar cells." *Journal of Environmental Chemical Engineering* 10.3 (2022): 107551.
- [4] Choi, J. H., Kim, S. O., Hilton, D. L., & Cho, N. J. (2014). Acid-catalyzed kinetics of indium tin oxide etching. *Thin solid films*, 565, 179-185.

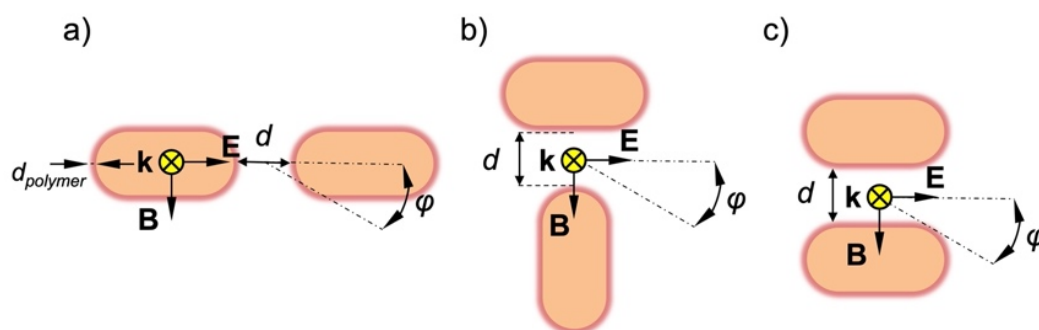
Wystąpienie ustne

HYBRYDYZACJA *IN SITU* MODÓW PLAZMONICZNYCH NANOCZĄSTEK METALICZNYCH W CIENKICH WARSTWACH NA GRANICY FAZ WODA-POWIETRZE

Michał Kotkowiak, Michał Mleczko

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej, Politechnika Poznańska 60-965 Poznań, Piotrowo 3
e-mail: michal.mleczko@student.put.poznan.pl

Nanopręty złota (AuNRs) charakteryzują się znakomitymi właściwościami fizycznymi, chemicznymi i biologicznymi. Ich kluczową cechą jest pochłanianie i rozpraszanie światła o różnych długościach fali w zależności od rozmiarów i kształtu w wyniku występowania zjawiska zlokalizowanego powierzchniowego rezonansu plazmonowego (LSPR). Posługując się techniką formowania warstw Langmuira naszym celem było znalezienie konkurencyjnej metody do badania nanocząstek (NPs) w cienkich warstwach w porównaniu do używanej dotychczas litografii. Pomiar *in situ* hybrydyzacji AuNRs pozwala na zrozumienie zjawiska hybrydyzacji AuNRs ze względu na przesunięcie maksimum LSPR [1-2]. Wykorzystując AuNRs sfunkcjonalizowane politlenkiem etylenu (PEG), byliśmy w stanie zaobserwować hybrydyzację w monowarstwach Langmuira. Wyniki eksperymentalne były wspierane poprzez analizy i symulacje komputerowe dimerów AuNRs. Badając trzy podstawowe konfiguracje dimerów AuNRs (rys. 1), wykazaliśmy prawdopodobne powiązanie sprzężenia plazmonowego AuNRs z napięciem powierzchniowym i długością łańcucha węglowodorowego PEGu. Przedstawione wyniki pozwoliły na zrozumienie hybrydyzacji AuNRs oraz wskazują nową drogę badań nanocząstek w monowarstwach.



Rysunek 1. Konfiguracje dimerów nanoprętów oddziaływujących koniec-koniec (a), geometria T (b), bok-bok (c) wraz z wektorami światła padającego.

Podziękowania

Niniejsze badania były finansowane z grantu przyznanego przez Narodowe Centrum Nauki 2019/35/D/ST4/02037.

Literatura

- [1] Prodan, E., Radloff, C., Halas, N. J., & Nordlander, P., *Science* **302** (2003) 419–422.
- [2] Kotkowiak et al., *Journal of Physical Chemistry C* **119** (2015) 6195–6203.

Wystąpienie ustne

SPEKTROSKOPIA RAMANA W BADANIACH RÓŻNYCH FORM POSTACI LEKÓW ZAWIERAJĄCYCH AGOMELATYNĘ

**Tobiasz Banaszek¹, Ariadna B. Nowicka¹, Mirosław Szybowicz¹, Radosław Wichniarek²,
Wiesław Kuczko², Dorota Tomczak³, Monika Wojtyłko⁴, Anna Froelich⁴, Barbara Jadach⁴,
Tomasz Osmalek⁴**

e-mail: tobiasz.banaszek@student.put.poznan.pl

¹Politechnika Poznańska, Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej, Instytut Badań Materiałowych i Inżynierii Kwantowej, ul. Piotrowo 3, 60-965 Poznań

²Politechnika Poznańska, Wydział Inżynierii Mechanicznej, Instytut Technologii Materiałów, ul. Piotrowo 3, 60-965 Poznań,

³Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, Instytut Technologii i Inżynierii Chemicznej, ul. Berdychowo 4, 60-965 Poznań,

⁴Uniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego, Wydział Farmaceutyczny, Katedra i Zakład Technologii Postaci Leku, ul. Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań

Na świecie miliony osób chorują na depresję. Choroba ta, dotyka nie tylko osoby starsze ale również dzieci i młodzież [1]. Skutki tej choroby potrafią dezorganizować życia oraz nierzadko prowadzić do pogorszenia innych chorób takich jak problemy z metabolizmem czy nadciśnieniem tętniczym [2]. Jedną z substancji pozwalająca na walkę z depresją jest agomelatyna. Agomelatyna o wzorze strukturalnym $C_{15}H_{17}NO_2$ jest atypowym lekiem antydepresyjnym stosowanym przede wszystkim w leczeniu depresji klinicznej jak i zaburzeń lękowych [3]. Agomelatyna może występować w przynajmniej 6 formach polimorficznych [4].

Druk 3D znalazł szerokie zastosowanie w wielu dziedzinach życia w tym w medycynie. Pozwala on na precyzyjne przygotowywanie i wytwarzanie implantów, protez jak również postaci leków spersonalizowanych pod konkretnego pacjenta [5]. W kontekście przeciwdziałaniu depresji druk 3D może dać narzędzia do wprowadzania leku bezpośrednio do krwiobiegu, zamiast pośrednio przez układ pokarmowy. Może to być zrealizowane poprzez nanoszenie leku na mikroigły, które byłyby wprowadzane w skórę w celu efektywniejszego przyswajania.

W niniejszej pracy zostaną przedstawione wyniki ramanowskiego rozpraszania światła agomelatyna oraz mikroigieł wykonanych różną metodą druku 3D powleczone warstwą różnych form postaci leku zawierających substancje czynną. Celem badań, było zbadanie wpływu temperatury oraz procesu starzenia na formę polimorficzną agomelatynę. Dodatkowo zbadano efektywność procesu wytwarzania mikroigieł oraz osadzania na nich substancji aktywnej.

Badania zostały wykonane w ramach projektu Narodowego Centrum Nauki Sonata Bis UMO 2021/42/E/NZ7/00125.

Literatura

- [1] CUIJPERS, Pim, et al. The effects of psychological treatments of depression in children and adolescents on response, reliable change, and deterioration: a systematic review and meta-analysis. *European Child & Adolescent Psychiatry*, 2023, 32.1: 177-192.
- [2] GOLD, Stefan M., et al. Comorbid depression in medical diseases. *Nature Reviews Disease Primers*, 2020, 6.1: 69.
- [3] R. A. Sansone, L. A. Sansone, Agomelatine: a novel antidepressant. *Innovations in clinical neuroscience*, 8.11 (2011) 10.
- [4] P. D. Crowley, H. C. Gallagher, Clotrimazole as a pharmaceutical: past, present and future *Journal of applied microbiology*, 117.3 (2014) 611-617
- [5] E. B. Souto, J. C. Campos, 3D printing in the design of pharmaceutical dosage forms. *Pharmaceutical development and technology*, 24.8 (2019) 1044-1053.

Wystąpienie ustne

WŁAŚCIWOŚCI SPEKTROSKOPOWE MAŁOCZĄSTECZKOWYCH ZWIĄZKÓW ORGANICZNYCH O BUDOWIE TYPU DONOR – II - AKCEPTOR

Kamila Łupińska, Lech Sznitko

Instytut Materiałów Zaawansowanych, Politechnika Wrocławska,
50-370 wyb. Wyspiańskiego 27, Wrocław, Polska
e-mail: kamila.lupinska@pwr.edu.pl

Małocząsteczkowe związki typu Donor- π -Akceptor (D- π -A) posiadają szereg potencjalnych zastosowań np. w optyce nieliniowej [1] czy generacji akcji laserowej [2]. Ich budowa molekularna pozwala na wewnątrzcząsteczkowy transfer energii (*j. ang.* Intramolecular Charge Transfer – ICT), co jest korzystne chociażby z punktu widzenia otrzymywania akcji laserowej. Opis zjawisk absorpcji i emisji w związkach wykazujących ICT może być zamodelowany czteropoziomowym diagramem energetycznym, który pozwala na wydajniejszą inwersję obsadzeń niż w wypadku układu trzypoziomowego. Kolejną zaletą układów typu D- π -A jest ich stosunkowo łatwa synteza pozwalająca na wręcz nieograniczone możliwości manipulacji podstawnikami, prowadząca do pełnej kontroli nad zjawiskami związanymi z przeniesieniem ładunku w obrębie molekuly.

Związki chemiczne, w których podstawione zostały pochodne furanów, ze względu na ich silne właściwości elektronowo-akceptorowe, mogą emitować światło w zakresie podczerwonym, gdzie znajduje się pierwsze okno biologiczne [3]. Dodatkowo, literatura podaje przykłady związków o podobnej budowie molekularnej dla których stwierdzono występowanie zjawiska emisji wywołanej/wzmocnionej poprzez agregacje (*j. ang.* Aggregation Induced/Enhanced Emission – AIE/AIEE) [4]. Wspomniane zjawisko jest aktualnie badane pod kątem wykorzystania go chociażby w bioobrazowaniu bądź przy wzmocnieniu emisji światła laserowego [5].

Prezentacja konferencyjna będzie skupiała się wokół przedstawienia właściwości spektroskopowych małocząsteczkowych związków organicznych o budowie typu Donor- π -Akceptor, gdzie akceptorem elektronów będzie stanowiła grupa pochodnych furanów, w szczególności trójcyjanofuran (TCF). Przedstawione zostaną wyniki badań nad zdolnością do AIE/AIEE, generacją akcji laserowej czy wstępne rezultaty nad nieliniowymi optycznymi właściwościami takimi jak 2-fotonowa absorpcja. Zostanie również poruszony temat wykorzystania badanych związków jako optycznych foto-przełączników.

Podziękowania: Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki (2020/39/O/ST5/01865).

Literatura

- [1] Z. Zheng, H. Liu, S. Zhai, H. Zhang, G. Shan, R.T.K. Kwok, C. Ma, H.H.Y. Sung, I.D. Williams, J.W.Y. Lam, K.S. Wong, X. Hu, B.Z. Tang, *Chem. Sci.* **11**, (2020), 2494–2503.
- [2] A. Szukalski, L. Sznitko, K. Cyprych, A. Miniewicz, J. Myśliwiec, *J. Phys. Chem. C*, **118**, (2014), 8102-8110
- [3] S. Redon, G. Eucat, M. Ipuay, E. Jeanneau, I. Gautier-Luneau, A. Ibanez, C. Andraud, Y. Bretonnière, *Dyes and Pigments*, *Dyes Pigm.*, **156**, (2018), 116-132
- [4] X. Yan, M. Remond, Z. Zheng, E. Hoibian, C. Soulage, S. Chambert, C. Andraud, B. Van der Sanden, F. Ganachaud, Y. Bretonnière, J. Bernard., *ACS Appl Mater Interfaces*. **10(30)**, (2018), 25154-2516.
- [5] K. Lupinska, M. Durko, C. Andraud, Y. Bretonnière, P. Hanczyc, P. Fita, P. Szulim, J. Myśliwiec, L. Sznitko, *J. Mater. Chem. C*, **11**, (2023), 4937-4945.

Wystąpienie ustne

SPEKTROSKOPOWE BADANIA PRZEJŚCIA FAZOWEGO METAL-IZOLATOR W CHIRALNYCH SOLACH DM-EDT-TTF Z ANIONAMI ClO₄ i ReO₄

Maria Sawińska¹, Iwona Olejniczak¹, Martin Dressel², Flavia Pop³, Narcis Avarvari³

¹Instytut Fizyki Molekularnej PAN, 60-179 Poznań, ul. Smoluchowskiego 17

²1. Physikalisches Institut, Stuttgart University, Pfaffenwaldring 57, D-70569 Stuttgart, Niemcy

³UMR 6200, CNRS, Laboratoire MOLTECH-Anjou, UFR Sciences, Angers University, Bât. K, 2 Boulevard Lavoisier, 49045 Angers, Francja
e-mail: marysia@put.edu.pl

Chiralne sole z przeniesieniem ładunku [(*S,S*)-DM-EDT-TTF]₂ClO₄ [1], [(*R,R*)-DM-EDT-TTF]₂ClO₄ [1], [(*S,S*)-DM-EDT-TTF]₂ReO₄ [2] oraz [(*R,R*)-DM-EDT-TTF]₂ReO₄ [2], gdzie DM-EDT-TTF = dimetyl-etylenoditio-tetratiafulwalen, należą do rodziny niskowymiarowych przewodników organicznych. W przypadku [(*S,S*)-DM-EDT-TTF]₂ClO₄ oraz [(*R,R*)-DM-EDT-TTF]₂ClO₄ niedawno potwierdzono efekt elektrycznej anizotropii magnetyczno-chiralnej [1]. Wszystkie te materiały podczas obniżania temperatury wykazują przejście metal-izolator w temperaturze około 40 K (sole z anionem ClO₄) lub około 110 K (sole z anionem ReO₄).

Aby wyjaśnić mechanizm przejścia metal-izolator w chiralnych solach DM-EDT-TTF, przeprowadzono badania widm odbiciowych w podczerwieni w zależności od temperatury w szerokim zakresie spektralnym. Nasze wyniki sugerują, że przejście metal-izolator może być związane z uporządkowaniem ładunku (charge ordering, CO), które stabilizuje się w niskiej temperaturze.

Literatura

[1] F. Pop, P. Auban-Senzier, E. Canadell, G. L. J. A. Rikken, N. Avarvari, *Nature Comm.* **5** (2014) 3757.

[2] N. Avarvari, nieopublikowane wyniki.

Wystąpienie ustne

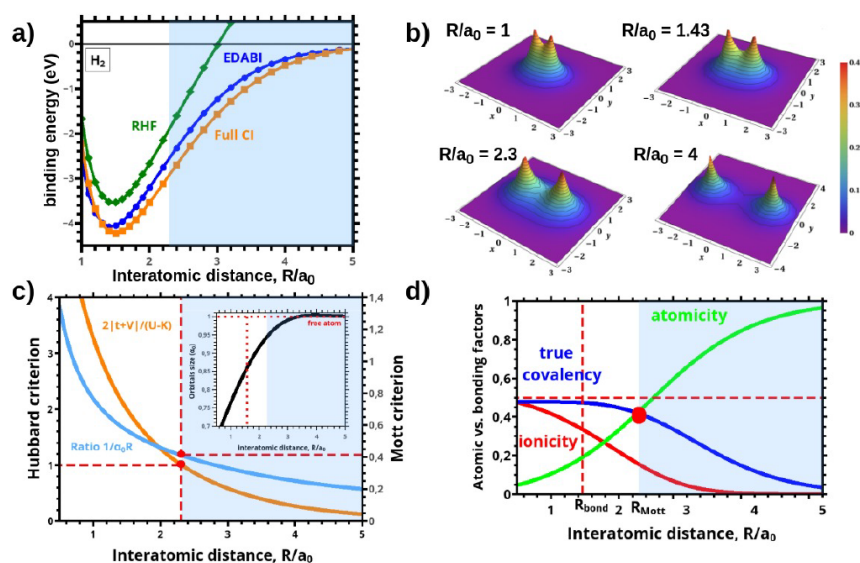
ATOMOWOŚĆ, WIĄZANIA CHEMICZNE I KOLEKTYWNE STANY ELEKTRONOWE W UKŁADACH MOLEKULARNYCH

M. Hendzel, M. Fidrysiak i J. Spalek

Instytut Fizyki Teoretycznej, Uniwersytet Jagielloński, ul. Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków
e-mail: maciej.hendzel@doctoral.uj.edu.pl

Słowa kluczowe: ścisła funkcja falowa, ścisła diagonalizacja, ab initio, wiązania chemiczne

Nasze badania skupione są wokół charakterystyki właściwości układów molekularnych oraz wiązań chemicznych [1]. Poprzez wprowadzenie pojęcia atomowości, charakteryzujemy wielcząstkową funkcję falową (ściśła dla molekuly wodoru) w kontekście jej atomowego charakteru oraz badamy wkłady atomowe do kolektywnych stanów elektronowych, skutecznie eliminując niepożądane zachowanie kowalencyjności wraz ze wzrostem odległości międzyatomowej [2]. Na rys. 1abcd przedstawiono główne charakterystyki, możliwe do otrzymania dla molekuly wodoru (w ramach ścisłego rozwiązania modelu Heitlera-Londona). Ponadto, koncepcja ta oferuje nową interpretację wiązań chemicznych, umożliwiając głębsze zrozumienie związanej z nimi fizyki. W naszej metodzie wykorzystujemy mikroskopowe parametry hamiltonianu (wariacyjne obliczanie całek wraz z optymalizacją rozmiaru orbitali) oraz ścisłą diagonalizację hamiltonianu zadanego w języku drugiej kwantyzacji. Takie podejście może być z powodzeniem stosowane do molekuł dwuatomowych, wieloatomowych oraz układów nanofizycznych [3].



Rysunek 1: Główne cechy wiązań na podstawie naszych dokładnych rozwiązań modelu Heitlera-Londona: (a) porównanie naszych wyników EDABI dla najniższej energii z innymi metodami; (b) ewolucja gęstości elektronowej w funkcji odległości międzyatomowej R/a_0 ; (c) punkty początku lokalizacji elektronowej (czerwone): znormalizowany rozmiar orbitalu atomowego w funkcji R ; obszar zacieniony: reżim silnej korelacji. (d)

Podziękowania

Badania zostały sfinansowane ze środków w ramach grantów OPUS z Narodowego Centrum Nauki o numerze UMO-2018/29/B/ST3/02646 oraz UMO-2021/41/B/ST3/04070.

Literatura

- [1] M. Hendzel, M. Fidrysiak, J. Spalek J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 55, 185101 (2022)
[2] M. Hendzel, M. Fidrysiak, J. Spalek J. Phys. Chem. Lett. 13 (44), (2022) pp. 10261-10266.
[3] E. Rocławik, M. Fidrysiak, M. Hendzel, J. Spalek, in Polish Quantum Chemistry from Kolos to Now, Advances in Quantum Chemistry, Vol. 87, edited by M. Musiał and I. Grabowski (Academic Press, 2023) p. 351–373.