CHEMIA FIZYCZNA. OD TEORETYCZNYCH PODSTAW CHEMII DO FIZYKOCHEMII MATERIAŁÓW

PHYSICAL CHEMISTRY. FROM THEORETICAL FOUNDATIONS OF CHEMISTRY TO PHYSICOCHEMISTRY OF MATERIALS

Ludwik Komorowski

Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny,
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław
e-mail: ludwik.komorowski@pwr.edu.pl

Wprowadzenie
1. Początki
2. Wzrost
3. Rozwój
4. Dojrzałość
5. Rozgałęzienia
6. Perspektywy
Piśmiennictwo cytowane

STRESZCZENIE

Opis narodzin oraz rozwoju fizykochemii w Politechnice Wrocławskiej, począwszy od pierwszych dni tej uczelni powołanej do życia we Wrocławiu po zakończeniu wojny. Szczegółowo omówiono rozmaitość tematyki badawczej oraz jej ewolucję wraz z zachodzącą na przestrzeni lat wymianą badaczy, reprezentowanych przez pięć kolejnych pokoleń profesorów czynnych w murach tej polskiej uczelni technicznej.

SYNOPSIS

The story of development of physical chemistry & chemical physics at the Wrocław University of Science and Technology established at the end of World War II. The variety of research topics has been discussed in details, together with their evolution as a consequence of the exchange of researchers, represented by five successive generations of professors active in the walls of this Polish technical university.

WPROWADZENIE

Dzieje instytucji powstałych we Wrocławiu po roku 1945 oraz budujących je ludzi były wielokrotnie opisywane w okolicznościowych wydawnictwach, także na Wydziale Chemicznym Politechniki [1, 2, 3]. Intencją autora obecnego szkicu jest obserwacja procesu narodzin i rozwoju naukowego środowiska fizykochemii. Historia tej grupy stworzonej w jednej uczelni, z czasem dzielonej między instytucje i wydziałowe rewiry, pozwala śledzić, jak krystalizowały się naukowe idee, jak rodziły się zdolne do wielkich rzeczy osobowości. W publikowanym dorobku zachowały się czytelne ślady ambicji i sukcesów, a także cienie niezrealizowanych planów i porażek. Widoczne są nazwiska współpracowników, zapisane kontakty, podróże i odwiedzane laboratoria, odnotowane źródła inspiracji oraz okoliczności odkryć. Autor podjął zadanie odczytania i wyeksponowania potencjału twórczego tego środowiska, kierując uwagę czytelnika na ewolucję tematyki badań oraz na systematyczny wzrost ich znaczenia, wymiernego rangą naukowych periodyków, w których były publikowane.

Analiza stopniowego rozszerzania zasięgu publikowanego dorobku od pism lokalnych, przez krajowe do sztandarowych periodyków światowych mogłaby dostarczyć ważnych wskazówek współczesnym menedżerom nauki. Dyskusje publiczne o poziomie nauki oraz spory o kształt reform akademickich wskazują bowiem, że przedstawiciele krajowej nauki, rozdarci między nauczycielską odpowiedzialnością a naukowymi ambicjami, nie znajdują dostatecznego oparcia dla swojej roli społecznej, ugruntowanej i oczywistej w krajach i uniwersytetach, którym los oszczędził dramatycznych wstrząsów [4].

Szeroka i nieostro zdefiniowana dziedzina fizykochemii podlegała w okresie powojennym dynamicznemu rozwojowi na ścieżkach innych niż sama chemia. Fizyka kwantowa dostarczyła inspiracji do tworzenia nowej bazy teoretycznej dla chemii, rozwijanej wcześniej w przeważającej części jako umiejętność praktycznego dokonywania transformacji materiałowych. Nowe techniki obserwacyjne, których sztandarowymi przykładami są krystalografia oraz rezonans magnetyczny, a równolegle teoria i obliczeniowe metody kwantowe, to dzieła fizyków, zagospodarowane na terenie chemii, której otworzyły niewyobrażalne wcześniej możliwości poznawcze. Fizykochemia w oczywisty sposób tworzyła pomost między dziedzinami chemii oraz fizyki, między obszarami eksperymentu i teorii w chemii. Formująca się we Wrocławiu grupa fizykochemików na każdym etapie rozwoju musiała rozpoznawać wyzwania swojej epoki.

1. POCZĄTKI

Od pierwszych dni powołanej w roku 1945 jedynej wrocławskiej uczelni pod nazwą Uniwersytet i Politechnika we Wrocławiu, przewidziano w jej Wydziale Chemicznym Katedrę Chemii Fizycznej, której wyznaczono pracownie opuszczone

przez *Institut für Physikalische Chemie* istniejącej od roku 1910 niemieckiej *Technische Hochschule Breslau* [5]. Pierwszy kierownik katedry, Kazimierz Gumiński [6], przybył w roku 1948 po habilitacji w Uniwersytecie Jagiellońskim, w katedrze zastał już pracownika, choć jeszcze studenta, Zdzisława Ruziewicza [7], wygnańca ze Lwowa. Dołączyli do niego dwaj przybysze z UJ, absolwent chemii Krzysztof Pigoń [8] oraz student Józef Rohleder [9].

Energia i szerokie horyzonty myślowe czterdziestoletniego kierownika zdecydowały o przyszłości rodzącego się zespołu. Posiadał doświadczenia w chemii praktycznej (studia w Politechnice Lwowskiej), w nauczaniu chemii (magisterium w UJ, stopień w owym czasie potwierdzał kwalifikacje pedagogiczne), w pracy naukowej na pograniczu chemii oraz fizyki (doktorat w Uniwersytecie Warszawskim) oraz studium w zakresie fizyki teoretycznej, podstawa jego habilitacji. Katastrofa wojenna skłoniła go do przemyślanej decyzji, którą jawnie ogłaszał: za swoją misję akademicką uznawał kształcenie młodych Polaków do roli odpowiedzialnych nauczycieli akademickich. Przewidywał, że to poziom ich wykształcenia i orientacja w trendach nauki światowej połączone z właściwą dla przyszłej misji rzetelnością w pracy badawczej, zdecydują zarówno o stanie odradzających się uczelni, jak o poziomie nowych pokoleń inteligencji niezbędnych dla przyszłości zrujnowanego kraju. Myśl umiał wdrażać: uczniów zdolnych do wykonywania doktoratu dobierał nie pod kątem przydatności do realizowania własnych naukowych ambicji, przeciwnie, oczekiwał od nich otwartości na nowe wyzwania, odwagi koniecznej do samodzielnej pracy oraz wytrwałości w pokonywaniu jej wyzwań. We wspomnieniach późnego ucznia znajdujemy opis legendarnych standardów kształcenia doktorantów Gumińskiego [10], a jego dziedzictwo można oceniać i we Wrocławiu, i w Krakowie, dokąd po sześciu latach powrócił. Rozpoznawalna do dziś Wrocławska Szkoła Chemii Fizycznej jest dziełem uczniów, których tu pozostawił.

2. WZROST

Pierwsze publikowane wyniki pracy badawczej młodego zespołu datowane są na rok 1951 i poświadczają tematykę prac dyplomowych wykonywanych w katedrze: Ruziewicz przedstawił wyniki badań fosforescencji soli aktywowanych jonami metali ciężkich, a w kolejnym roku obszerny przegląd literatury przedmiotu [11], program dalszych badań. Bogdan Baranowski publikował wyniki prac nad konwekcją w roztworach wodnych [12], badał procesy nierównowagowe (termodyfuzja, transport ciepła). Wraz z Jadwigą Demichowicz przedstawili szeroki przegląd tematu [13], a zwieńczeniem tego obszaru badań w katedrze była jej samodzielna praca o współczynniku Soreta opublikowana w periodyku

brytyjskim [14];Baranowski będzie kontynuował tę tematykę w Warszawie, krocząc śladami mistrza [15].

Długofalowy kierunek badań nad półprzewodnikami rozpoczął w katedrze Pigoń, publikując pierwsze wyniki równolegle w trzech pracach wydanych w roku 1952. Jego wysiłki miały charakter rozpoznawczy, celem było otwarcie badań nad przewodnictwem elektrycznym (także nad innymi właściwościami elektrycznymi) materiałów dielektrycznych w stanie stałym [16]. Pierwsza jego samodzielna praca w tej dziedzinie [17] oraz wnikliwy przegląd tematu [18] stanowiły podstawę długofalowego programu badań kryształów molekularnych; pierwsze odkrycie to doniesienie (*Letter*) o nośnikach prądu w antracenie w *Journal of Chemical Physics* [19].

Wspólny mianownik pierwszych prac Rohledera to koncentracja na postaci krystalicznej substancji, docelowo materiałów organicznych [20]. Pilotowe eksperymenty wykonywał na domieszkowanych kryształach KCl, mierząc ich widma absorpcyjne oraz efekt fotoelektryczny [21]. Lucjan Sobczyk, rozpoczynający pracę badawczą w tym samym czasie, jako swoje pierwsze publikowane dzieło ogłasza przegląd wiedzy o wiązaniu wodorowym oraz klasyfikację tych wiązań [22]. Tematyka wyznaczy azymut naukowej drogi dla odrębnej grupy fizykochemicznej, którą stworzył w Uniwersytecie Wrocławskim po formalnym odseparowaniu tej uczelni od Politechniki. Różnorodność tematyki badawczej w pierwszych latach dopełniają prace Wacława Hendricha badającego efekt foto-galwaniczny, zmierzając do badań fotosyntezy [23]; rozwinie je samodzielnie we wrocławskiej uczelni medycznej.

W latach sześćdziesiątych XX w. ustabilizowany i doświadczony zespół śmiało wkracza na niezbadane obszary. Pigoń publikuje przełomową metodę określania ruchliwości nośników prądu w półprzewodnikach na podstawie efektu Halla (w *Journal of Applied Physics*) [24]; dołącza doń Henryk Chojnacki, rozpoczynając pomiary elektryczne kryształów organicznych [25]. Wyniki publikują w polskim anglojęzycznym piśmie *Acta Physica Polonica*, sygnalizując nowe otwarcie w badawczej pracy [26], która umożliwi Chojnackiemu samodzielne publikowanie w periodykach zagranicznych [27]. Doświadczenia wykorzysta Juliusz Sworakowski stawiający pierwsze kroki w badaniach ruchliwości i stanów pułapkowych w kryształach organicznych [28]. Już wstępne efekty pozwoliły mu wkroczyć na arenę piśmiennictwa światowego [29, 30], wdrażając badania natury i roli stanów pułapkowych w kryształach [31].

Ruziewicz zakończył pierwszy etap swoich badań nad fosforescencją serią artykułów przeglądowych [32]. Skierował uwagę na widma kwaziliniowe, specjalistyczny teren spektroskopii elektronowej. Otrzymywane techniką głębokiego zamrażania próbki w rozcieńczonych roztworach węglowodorów [33]

ujawniały rozdzielczość widmową niemożliwą do uzyskania innymi metodami w owym czasie. Cierpliwie tworzył przez lata zespół, który zasłynie niezwykłą precyzją swoich wyników [34].

Rodzące się metody spektroskopowe zainteresowały również Rohledera; jego pomiary widm IR kryształów organicznych [35] przyciągną do zespołu licznych współpracowników. Magdalena Szostak wkroczyła w obszar bliskiej podczerwieni [36], a jej badania właściwości elektrooptycznych nitroanilin dostarczyły inspiracji dla przyszłych obserwacji optycznych efektów nieliniowych w materiałach organicznych. Podobne pomiary rozpoczynał Tadeusz Luty [37], lecz rozwinął swoje zainteresowania na obszar teoretyczny, publikując model gazu zorientowanego, użyteczny w interpretacji widm [38]. Inni współpracownicy wdrażali nowe techniki pomiarowe dla kryształów organicznych takie jak rozszerzalność cieplna [39], podatność magnetyczna i jej anizotropia [40] oraz efekty cieplne przemian fazowych [41]. Z kapitału tych doświadczeń będą korzystali adepci kolejnego pokolenia, którzy wkrótce zapełnią laboratoria fizykochemików.

Potwierdzeniem pozycji, jaką młody zespół zdobył na scenie nauki krajowej w swoim pierwszym dwudziestoleciu, było zaproszenie jego przedstawicieli do udziału w prestiżowym wydawnictwie: Pigoń i Ruziewicz dołączyli do grupy autorów pierwszego powojennego podręcznika chemii fizycznej [42].

3. ROZWÓJ

W kolejnych dwóch dekadach zbiorowe doświadczenie zespołu fizykochemików pozwoliło im eksplorować frontowe obszary ówczesnej wiedzy, a zarazem przyciągało do grupy talenty. Wykorzystywali otwartą po latach możliwość kontaktów międzynarodowych, koncentrując się na tym etapie częściej na aplikacjach własnego potencjału badawczego do niezmierzonego bogactwa substancji organicznych, niż na selekcjonowaniu szczególnych celów swoich wysiłków.

Rozliczne techniki badawcze testowano w zespole Rohledera: dwójłomność kryształów organicznych [43], anizotropia ich podatności diamagnetycznej [44], polaryzowalność [45], dichroizm widm IR [46], właściwości elektrooptyczne [47, 48] oraz systematyczne badania struktury krystalicznej, które trafiają już do renomowanego pisma *Acta Crystallographica* [49]. Luty podejmuje samodzielne badania dynamiki sieciowej, zmierzając do ich teoretycznego opisu [50]. Jego dziełem będzie pierwsza pełnowymiarowa praca publikowana w *J. Chem. Phys.* [51], w którym odtąd już systematycznie będą się pojawiać prace grupy wrocławskiej [52, 53]. Bogdan Kuchta wdrożył pod jego kierunkiem teoretyczny projekt modelowania struktury i dynamiki kryształów zestalonych

gazów, najprostszy model kryształu molekularnego [54]. Jego pierwsze wyniki trafią na światowe forum prezentacji osiągnięć w fizyce - *Physical Review* [55], a ich zastosowanie do mieszanych kryształów organicznych otworzy przed autorami drogę do opisu przemian fazowych [56].

Chojnacki, który jeszcze w Krakowie poznawał podstawy teorii kwantowej, teraz zdecydował się porzucić eksperyment dla teorii. Pierwsze efekty pracy w chemii kwantowej opublikował w *Theoretica Chimica Acta* [57]. Nowa specjalność okazała się magnesem dla młodych, których wspólnym dziełem stało się wdrażanie niezbędnych technik obliczeniowych, w tamtym czasie wymagających jeszcze specjalistycznej wiedzy [58]. Andrzej Sokalski już w swoich pierwszych krokach zdradzał zainteresowanie biologią [59, 60]; na początek musiał pokonywać liczne bariery matematyczne, metodyczne i techniczne. Był autorem nowatorskiej metody znajdowania atomowych momentów multipolowych [61], którą wykorzystał ją do modelowania aktywności enzymów [62]. Józef Lipiński stworzył własny wariant półempirycznej metody obliczeniowej [63], którą szeroko udostępniał do interpretacji widm, eksperymentalnie badanych po sąsiedzku [64], nie stroniąc od zastosowań medyczno-biologicznych [65, 66]. Szczepan Roszak, wstępując w ich ślady, publikował prace wraz z chemikami praktykującymi syntezę organiczną [67], to doświadczenie utorowało mu drogę do teoretycznej analizy ścieżek reakcji chemicznej [68, 69].

Dzięki nowym narzędziom oraz wymianie międzynarodowej znacznie poszerzono badania spektroskopowe materiałów organicznych w stanie stałym. Systematycznie badano widma kwaziliniowe, w tym fluorescencję [70], fosforescencję [71] i absorpcję [72]; publikacjom widm towarzyszy już teoretyczna analiza metodami chemii kwantowej. Widma fluorescencyjne są wykorzystywane także do analizy defektów w kryształach [73], a spektroskopia Ramana wejdzie do użytku jako rutynowe narzędzie badania kryształów organicznych [74 , 75]; w zasięgu zespołu pojawią się nawet techniki badań neutronowych [76, 77] oraz rozpraszanie Brillouina [78].

Rozwinięte przez Sworakowskiego badania stanów pułapkowych w kryształach organicznych [79] oraz wyniki pomiarów ich elektroluminescencji [80] stały się zaczynem nowego strumienia badań właściwości elektrycznych tych materiałów. Wdrożono pionierską metodę bezpośrednich pomiarów ruchliwości nośników w antracenie [81]. Marek Samoć dokonał obserwacji efektu Poola-Frenkela [82], efektu Pockelsa [83] oraz opisywał procesy wielofotonowe w kryształach [84], a jego pomiary fotoprzewodnictwa laserem impulsowym zapowiadały przyszłe zainteresowania autora [85]. Specjalnością Andrzeja Miniewicza było odkrywanie szczególnych właściwości kryształów molekularnych – piezoelektrycznych [86], piroelektrycznych [87], ferroelastycznych [88], ferro-

elektrycznych [89] i elektrooptycznych [90]. Manifestem programu tego zespołu badaczy stała się ich wspólna praca w czasopiśmie pod demonstracyjnie nowatorskim tytułem *Journal of Molecular Electronics* [91].

Podstawą dla rozwijanych żywiołowo badań fizycznych i teoretycznych materiałów organicznych pozostawała na tym etapie ich wspólna baza: zaprogramowane, choć pozostające w cieniu poszukiwania obiecujących substancji do zastosowań elektrycznych i optycznych, wdrażane pod patronatem Pigonia. Obszarem pierwszych eksploracji tej grupy były organiczne kompleksy CT (*charge transfer*) [92]. Wizja nadprzewodnictwa (Nobel w fizyce, 1972) skłaniała do podejmowania szczegółowych badań przemian fazowych, ta myśl była spoiwem rozbieżnych kierunków poszukiwań. Odkrycie nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego (Nobel w fizyce, 1987) oraz przewodzących polimerów (Nobel w chemii, 2000) potwierdziło słuszność ugruntowanej we Wrocławiu metody. Jednak organiczne materiały wysoko przewodzące uzyskiwane w formie polikrystalicznej (sole TCNQ, [93]) lub amorficznej (poliacetyleny [94, 95]) wymagały szerokiego udziału planowanej syntezy chemicznej, podczas gdy doświadczenie grupy było ograniczone do pomiarów fizycznych ich dielektrycznych kryształów [96]. Brak łączności tematycznej oraz metodycznej z chemią, w której ramach specjalność chemii fizycznej wyrosła, okazała się barierą dla rozwijania dalszych badań eksperymentalnych w tej dziedzinie.

Intensywny rozwój grupy po roku 1970 znacząco rozszerzył jej potencjał twórczy nie tylko w pracy badawczej. Dziełem tego okresu były także podręczniki, które zagoszczą na stałe na rynku krajowym [97], nie brak i monografii zagranicznej [98]. Publikacje wyników w czołowych periodykach oraz liczne dowody współpracy z laboratoriami całego świata dowiodły kompetencji zespołu. Ujawniły także charakterystyczne dla tego okresu nowe zjawiska takie jak gwałtowny przyrost prac teoretycznych i obliczeniowych, a w dziedzinie doświadczalnej dominacja eksperymentalnych metod fizyki, ukierunkowanych na badania materiałowe.

4. DOJRZAŁOŚĆ

W roku 1990 fizykochemicy tworzyli już znaczący zespół badaczy dysponujący doświadczeniem oraz roboczymi kontaktami w świecie – byli przygotowani na wyzwania, zdolni wprowadzać w tajniki teorii i eksperymentu fizykochemii nie tylko absolwentów chemii. Wspólne ramy organizacyjne w postaci wyodrębnionego instytutu pozwoliły grupie skutecznie dyskontować sukcesy dla zdobywania materialnego wsparcia nieoczywistego w dobie przemian i reorganizacji.

Liczne kontakty zagraniczne Lutego oraz jego stała z nimi współpraca przynosiła owoce w postaci fundamentalnych prac nad koncepcjami kontroli i transformowania materiałów molekularnych przy pomocy czynników fizycznych, szczególnie światła. Pracą publikowaną w *Science* wykazał istnienie w układach molekularnych mechanizmu transformującego energię termiczną, mechaniczną i promieniowania [99]. Jego koncepcja elastycznych multipoli otworzyła możliwość obserwacji zmian strukturalnych w ich naturalnej skali czasu (ultra-szybka foto-krystalografia, w *JACS*) [100], pozwalając na ilościowy opis silnie nierównowagowych reakcji foto-indukowanych [101] oraz procesu detonacji w molekularnych materiałach energetycznych [102]. Równoległe prace Kuchty wykorzystują nowatorską wówczas metodę Monte-Carlo [103]. Do badań krystalograficznych dołączyła warszawska krystalografka Ilona Turowska-Tyrk, przywożąc kapitał doświadczeń zagranicznych. Jej analiza rzadkiej struktury związku koordynacyjnego trafiła do *JACS* [104], a inna praca została wyróżniona przez *International Union of Crystallography* [105]; współpracowała z grupami innych dziedzin chemii [106, 107].

Nowe narzędzia komputerowe otworzyły bezmiar możliwości przed zespołem chemii kwantowej. Wypracowana biegłość w teoretycznych podstawach obliczeń kwantowych stała się dźwignią ich bogatej twórczości. Sokalski zdobył niekwestionowaną pozycję pracami o aktywności katalitycznej enzymów (w *JACS*) [108, 109, 110]. Lipiński był autorem samodzielnych prac, które zyskały szeroki rezonans w chemii teoretycznej [111, 112]; jego obliczenia wspierały badania spektroskopowe [113] oraz podejmowane przez Komorowskiego zastosowania konceptualnej teorii DFT do opisu właściwości reaktywnych cząsteczek [114]. Młodsi badacze poszukiwali własnych, oryginalnych ścieżek w chemii teoretycznej i obliczeniowej: Krzysztof Strasburger, publikujący początkowo z Chojnackim [115], był autorem jednych z najdokładniejszych obliczeń oddziaływań antymaterii i cząsteczkami [116]. Tadeusz Andruniów, krakowski biofizyk-teoretyk, wniósł doświadczenie w komputerowym projektowaniu biomimetycznych przełączników molekularnych (w *Angewandte Chemie*) [117 , 118] oraz obliczaniu struktur i właściwości stanów wzbudzonych białek fluorescencyjnych (w *JACS*) [119, 120]; jego praca o ewolucji stanów wzbudzonych trafiła do elitarnego *Proceedings of the National Academy of Sciences USA* [121]. Imponującą aktywność rozwinął Roszak, najbardziej wówczas płodny autor grupy kwantowej, śledził m. in. wpływ przyłączenia elektronu oraz wibracji wiązań wodorowych na stabilność cząsteczek [122, 123]. Współpracował z zespołami w chemii praktycznej w opracowaniu widm [124], pod jego kierunkiem rozpoczął naukową drogę Robert Góra [125]. Pokoleniowy rówieśnik tego ostatniego, Wojciech Bartkowiak publikował z Lipińskim prace o efektach rozpuszczalnikowych [126] i rozwinął je w szerokim studium hiperpolaryzowalności [127]; będzie je kontynuował Robert

Zaleśny, tworząc pomost do optyki nieliniowej, eksperymentalnie badanej w sąsiednich laboratoriach [128].

Badania eksperymentalne kryształów molekularnych mające w zespole długą tradycję, uległy stopniowej ewolucji: już nie pomiary elektryczne lecz własności optyczne ogniskowały uwagę badaczy. Wyrafinowane narzędzia pomiarowe umożliwiły obserwację subtelnych efektów nieliniowych oraz fotochemicznych, które otwierały niezmierzone pole eksploracji dla grup posiadających już doświadczenia w tej dziedzinie. Sworakowskiego zainteresowały efekty fotochromowe w roztworach ciekłych i w matrycach polimerowych [129]. Katarzyna Matczyszyn badała podobne efekty w kryształach ciekłych [130, 131]. Pionierem badań ciekłych kryształów był Miniewicz, jego bogata twórczość obejmowała próby stosowania ciekłych kryształów w holografii [132], w fotonice [133], w składowaniu informacji [134]. W pracach nad zastosowaniem materiałów polimerowych [135] towarzyszył mu Stanisław Bartkiewicz [136], na kolejnym etapie dołączył Jarosław Myśliwiec, z którym wspólnie opublikowali programowy artykuł przeglądowy o oddziaływaniu światła na warstwy ciekłokrystaliczno-polimerowe [137]; w badania holografii na polimerach włączyła się Anna Sobolewska [138].

Najnowszy rozdział badań eksperymentalnych w fizykochemii otworzył powracający po latach do zespołu Samoć; przywiózł nie tylko świeże projekty badawcze, lecz i szczególne doświadczenie menedżerskie w ich organizacji oraz pożyteczne kontakty współpracowników za granicą. Już w pierwszych latach zasłynął serią zespołowych publikacji o nieliniowych własnościach optycznych związków organometalicznych (w *Angewandte Chemie*) [139 , 140] oraz o zastosowaniach chromoforowych układów π-elektronowych w roli przełączników optycznych (w *JACS*) [141, 142, 143]. Jego program przyciągnął młodych, którzy wkrótce utworzą z nim trwały zespół: Marcin Nyk wyspecjalizuje się w optycznych zastosowaniach związków lantanowców [144], Joanna Olesiak-Bańska będzie badała nanostruktury złota [145], a Dominika Wawrzyńczyk nanostruktury dotowanych kryształów koloidalnych [146]; do grupy dołączy Matczyszyn wnosząc do programu elementy zastosowań biologicznych materiałów nieliniowych [147]. Energia nowej grupy oraz jej nowatorska tematyka pociągała także innych doświadczonych współpracowników włączających się do badań nowych materiałów [148], opracowań teoretycznych [149] bądź chemicznych [150].

Potwierdzeniem doświadczenia szerokiego zespołu fizykochemików w Politechnice, światowej renomy jego dzieł, a zarazem świadectwem jego szerokiej współpracy w kraju i na świecie, są opracowania monograficzne publikowane w oficynach o światowym zasięgu. Znajdujemy tu skondensowany ślad zainteresowań i kompetencji twórców w rozlicznych obszarach materiało-

• wych i metodologicznych.

Materiały: elektronika molekularna [151], reakcje w stanie stałym [152, 153], nieliniowe właściwości materiałów molekularnych [154, 155], polimery [156], klastery [157, 158], warstwy molekularne [159, 160], efekty rozpuszczalnikowe [161, 162], zastosowania biomedyczne [163, 164] i ogólno chemiczne [165].
Metody: chemia kwantowa i obliczeniowa [166, 167, 168], modelowanie i projektowanie materiałów [169, 170], w szczególności w zastosowaniach do inhibitorów enzymów [171, 172].

Dziełem wieńczącym wiek dojrzały fizykochemii w Politechnice stał się podręcznik chemii fizycznej w najszerszym rozumieniu tego przedmiotu. To opracowana zbiorowym wysiłkiem rozszerzona wersja pierwowzoru Pigonia i Ruziewicza [97], pogłębiona doświadczeniami ich uczniów oraz innych użytkowników metod fizykochemicznych z wielu obszarów chemii eksperymentalnej [173].

5. ROZGAŁĘZIENIA

Ostatnie lata szerokiego zespołu fizykochemików wirtualnie wciąż istniejącego w Politechnice, choć w zmiennych formach organizacyjnych, są potwierdzeniem jego możliwości twórczych. W *Angewandte Chemie* ukazują się prace Kuchty [174, 175, 176] oraz Samocia [177] o zastosowaniach materiałów metaloorganicznych w adsorpcji, Góra z zespołem publikuje w *Nature* oryginalne studium o syntezie prebiotycznej [178, 179]. Doniesienia o wynikach zespołu Samocia trafiają do *Journal of American Chemical Society* [180], *Chemical Society Reviews* [181, 182] i *Chemical Science* [183].

Także publikacje w mniej eksponowanych źródłach dowodzą znaczącego postępu na drodze do realnej już elektroniki molekularnej: prace Sworakowskiego zaowocowały koncepcją przełącznika molekularnego [184] oraz tranzystorów modulowanych w wyniku reakcji fotochromowej [185], Miniewicz z Bartkiewiczem przedstawili odkrycie laserowej pincety optycznej [186], dziełem Turowskiej-Tyrk jest monitorowanie fotoindukowanych zmian strukturalnych w kryształach [187], Adam Kiersnowski bada właściwości filmów polimerowych do zastosowań w tranzystorach [188]. Wśród prac teoretycznych pojawiają się opracowania monograficzne nieliniowych właściwości optycznych [189], efektów rozpuszczalnikowych [190] oraz monitorowania ścieżek reakcji [191].

Tematyka oraz miejsce publikacji prac sygnalizują wagę dorobku badawczego, na co dzień ogłaszanego w ilości ok. 100 publikacji rocznie. Wraz z poszerzającą

się dziedziną badawczą, powiększa się zasięg innych czasopism wysoko notowanych, przyjmujących doniesienia o wynikach autorów.

Prace z obszaru nanotechnologii trafiały do najwyżej ocenianych pism z tej dziedziny: *Nano research* [192], *Nano Letters* [193] i *Small* [194]. Znaczące prace spektroskopowe oraz optyczne drukowano w *Advanced Functional Materials* [195] oraz *Advanced Optical Materials* [196]. Liczne były opracowania nowych materiałów znajdujących szerokie zastosowania, które opisywano w pismach specjalistycznych: do *Journal of Materials Chemistry* trafiły prace o materiałach nieorganicznych [197], organicznych [198] oraz biologicznych [199]. Właściwości nowych kompozytów typu *metal-organic* opisywano w *Chemistry of Materials* [200] i *Journal of Journal of Colloid and Interface Science* [201].

Publikacje w czasopismach podstawowych dla chemii fizycznej, chemii kwantowej i obliczeniowej oraz fizyki stanowią już od wielu lat dobrze ugruntowany fundament dorobku naukowego grupy (ok. 50% wszystkich prac), lecz na bogatej liście publikowanych doniesień zauważyć można wyraźne sygnały szerszych zainteresowań. Dzięki współpracy krajowej i międzynarodowej rośnie liczba publikowanych badań w obszarach chemii odległych od podstaw chemii lub fizyki, jak pokazują wybrane przykłady pism publikujących efekty naukowej twórczości tej grupy w ostatnich sześciu latach (liczba prac w nawiasie).

Technologia: (1) *Environmental Technology*, (1) *Adsorption Science & Technology*, (1) *Macromolecular Materials and Engineering*, (1) *Powder Technology*.

Materiały: (12) *Dyes and Pigments*, (2) *Microporous and Mesoporous Materials*, (1) *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, (2) *ACS Applied Materials & Interfaces*, (5) *Colloids and Surfaces*, (4) *Journal of Molecular Liquids*, (7) *Crystal Growth & Design*.

Nano: (6) *Nanomaterials*, (4) *Nanoscale*, (4) *Journal of Nanoparticle Research*.

Bio-Med: (2) *Journal of Inorganic Biochemistry*, (1) *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*, (1) *Biomacromolecules*.

Modelowanie: (2) *Journal of Chemical Information and Modeling*, (1) *Journal of Computer-Aided Molecular Design*.

Metody: (1) *Journal of Chromatography*, (2) *Electrochimica Acta*, (1) *Advanced Synthesis & Catalysis*.

Elektronika organiczna: (1) *Sensors and Actuators*, (1) *Light, science & applications*, (7) *Organic Electronics*.

- Przedstawiona lista dowodzi, że metody instrumentalne, obliczeniowe i teoretyczne fizykochemii, w których rozwoju czynnie uczestniczy grupa fizykochemiczna w Politechnice, zyskały sobie trwałe miejsce we wszelkich obszarach chemii oraz w poszukiwaniach materiałowych, a wysokie kompetencje zespołu są szeroko uznane w innych obszarach nauki.

6. PERSPEKTYWY

Opisana twórczość pięciu pokoleń wrocławskich fizykochemików związanych z Politechniką dokumentuje proces odradzania się i formowania materialnej substancji, a wraz z nią także niezbywalnego przymiotu uczelni akademickiej – jej ducha. Zasadne jest pytanie o trwałość tak budowanego warsztatu wobec oczywistych barier wzrostu w uczelnianym otoczeniu, służebnym względem misji edukacyjnej. Fundamentem zapewniającym stabilność osobom twórczo zaangażowanym w uczelni wyższej jest związek ich naukowej aktywności z prowadzonym nauczaniem, tą drogą docierają do laboratoriów wysoko kwalifikowani kandydaci, tu profesorowie, wprowadzając słuchaczy w tajniki wiedzy, sami zyskują świeży ogląd rzeczywistości podlegającej wspólnym badaniom.

Fizykochemicy w Politechnice Wrocławskiej są czynni w nauczaniu studentów na dwóch klasycznych kierunkach kształcenia – chemia (oraz jej gałęzie techniczne) i fizyka, a ponadto na dwóch kierunkach nowoczesnych, w których kreowaniu mieli istotny udział: - biotechnologia oraz inżynieria materiałowa. Wzajemne oddziaływanie nauczanych treści oraz tematyki prac badawczych jest przejrzyście widoczne w opisywanej ewolucji publikowanych rezultatów. Jednak skutkiem rosnącej specjalizacji badaczy jest rozchodzenie się zainteresowań, pogłębiana wiedza wycinkowa zawęża pole oddziaływań z otoczeniem, a rezultatem jest stopniowa utrata wspólnego języka opisu zjawisk. Skuteczną tamę dla tego nieuchronnego zjawiska stwarzają rygory sali wykładowej. Nauczanie w kontakcie z przedstawicielami innych specjalności zmusza bowiem do namysłu nad rolą własnych doświadczeń i wiedzy w całościowym rozwoju chemii oraz dziedzin pokrewnych. Tylko dzięki takiej refleksji możliwe staje się przekraczanie pułapu wąskiego kształcenia zawodowego, by otwierać przed słuchaczami nowe horyzonty poznania. Do takich wyzwań czynni dziś badacze interdyscyplinarnej grupy fizykochemików w Politechnice są doskonale przygotowani.

Zaprezentowana historia fizykochemii od jej narodzin do rozkrzewionej dojrzałości jest pouczająca: najgłębszym sekretem rozwoju, sukcesów oraz siły przyciągania tego środowiska jest zaszczepiony przy jej narodzinach duch wspólnoty i współpracy. Niekoniecznie w wielkich projektach, lecz w naukowej

codzienności, która poprzez robocze kontakty, wspólne seminaria, dyskusje oraz równoległe nauczanie pozwala indywidualnościom zachować wspólny język komunikacji, niezbędne narzędzie postępu we wszelakich dziedzinach. Taka atmosfera możliwa jest jedynie w kulturze prawdziwie uniwersyteckiej, niebezpiecznie podminowywanej na naszych oczach przez wszechobecne współzawodnictwo oraz kult osobistego sukcesu [202].

PIŚMIENNICTWO CYTOWANE

W odnośnikach literaturowych podano pełne brzmienie tytułów cytowanych publikacji, jako konieczne uzupełnienie informacji podawanych w treści niniejszego artykułu o tematyce badań i związanych z nią autorach. Szeroko wykorzystano pozycje o charakterze monograficznym oraz przeglądowym (także w języku polskim: *Wiadomości Chemiczne*, *Postępy Fizyki*), w których zainteresowany czytelnik znajdzie szersze omówienie zagadnień sygnalizowanych w artykule.

[1] Lewanowicz, A. Archiwum chemii fizycznej. Bibliografia specjalna 1945-1995. *Biuletyn Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej Politechniki Wrocławskiej*, **1995**, *1*.

[2] Komorowski, L. [Red.], *Archiwum Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej Politechniki Wrocławskiej 1994-2014*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, **2019**.

[3] *Księga Jubileuszowa Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej 1945-2015*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, **2015**.

[4] Komorowski, L. *Bez drogowskazu. Akademickie rozdroża*, Wydawnictwo Uniwersytetu Warszawskiego, **2020**.

[5] *Historia Technische Hochschule Breslau* [Oprac. J. Pytel], https://weny.pwr.edu.pl/o-wydziale/profil-wydzialu/historia .

[6] Życzkowska, T., Petelenz, P., Komorowski, L. Kazimierz Gumiński. Życie i twórczość. [W:] *Archiwum Instytutu ChFiT*, op. cit.

[7] Pigoń, K., Olszowski, A. Zdzisław Ruziewicz (1925-1997), *Wiad. Chem.* **1998**, *52*, 617.

[8] Komorowski, L. Prof. dr hab. Krzysztof Pigoń (1925-2001). Biografia naukowa. [W:] *Archiwum Instytutu ChFiT*, op. cit.

[9] Rohleder, J. *Moje życie z Różą*, Wydawnictwo Lektorium, Wrocław **2004**.

[10] Petelenz, P. Jak hartowało się doktoranta – szkoła naukowa profesora Kazimierza Gumińskiego, *Wiad. Chem.* **2019**, *73*, 5-6.

[11] Ruziewicz, Z. Analiza luminescencyjna w chemii, *Wiad. Chem.* **1953**, *7*, 489.

[12] Baranowski, B. Isotherme Konvektionsstromung wässriger KMNO4-Lösung, *Naturwissenschaften* **1951**, *17*, 405.

[13] Baranowski, B., Demichowicz, J. Termodyfuzja w fazie ciekłej, *Wiad. Chem.* **1955**, *9*, 379.

[14] Demichowicz-Pigoniowa, J. Soret coefficient and heat transport of aqueous solutions of cadmium sulphate *Trans. Faraday Soc.* **1963**, *59*, 2268.

[15] Baranowski, B. *Nierównowagowa termodynamika w chemii fizycznej*, PWN, Warszawa **1974**.

[16] Trzebiatowski, W., Pigoń, K. Przewodnictwo elektryczne tytanianu barowego, *Rocz. Chem.* **1952**, *26*, 494.

[17] Pigoń, K. Przewodnictwo elektryczne p-dwuhydroksybenzenu w stanie stałym, *Rocz. Chem.* **1955**, *29*, 939.

[18] Pigoń, K. O półprzewodnikowych własnościach związków organicznych, *Wiad. Chem.* **1956**, *10*, 454.

[19] Pigoń, K., Chojnacki, H. Ratio of ranges of free carriers in anthracene surface cell, *J. Chem. Phys.* **1959**, *31*, 272.

[20] Rohleder, J. Widmo absorpcyjne monokryształów p-dwuhydroksybenzenu w nadfiolecie, *Rocz. Chem.*, **1954**, *28*, 687.

[21] Rohleder, J. Własności kryształów KCl, zawierających centra talu metalicznego. I. Efekt fotoelektryczny, *Rocz. Chem.*, **1955**, *29*, 613; II. Widmo absorpcyjne, *Rocz. Chem.* **1955**, *29*, 1061.

[22] Sobczyk, L. Aktualne problemy wiązania wodorowego, *Wiad. Chem.* **1954**, *28*, 341; Klasyfikacja wiązań wodorowych, *Rocz. Chem.* **1955**, *29*,1081.

[23] Hendrich, W. Efekt foto-galwaniczny w układzie tionina-tiosinamina, *Rocz. Chem.* **1955**, *29*,1149; Współczesne poglądy na fotosyntezę, *Wiad. Chem.* **1957**, *11*, 570.

[24] Pigoń, K. A graphical method for determination of mobility ratio in the semiconductors, *J. Appl. Phys.* **1961**, *32*, 2369.

[25] Chojnacki, H. Anisotropy of electrical conductivity in p-nitrophenol crystals, *Acta Phys. Polon.* **1963**, 24, 289; Fotoprzewodnictwo w kryształach organicznych, *Wiad. Chem.* **1964**, *18*, 91.

[26] Pigoń, K., Chojnacki, H. A new method of evaluating of anisotropy electric conductivity in organic crystals, *Acta Phys. Polon.* **1967**, *31*, 1061.

[27] Chojnacki, H. Temperature dependence of current carriers mobilities in anthracene, *Mol. Cryst.* **1968**, *3*, 375.

[28] Pigoń, K., Sworakowski, J. Space-charge-limited currents in p-chloranil crystals measured using the liquid electrodes, *Acta Phys. Polon.* **1967**, *32*, 329.

[29] Sworakowski, J. Hole injection into organic crystals from liquid redox electrodes, *Surface Sci.* **1968**, *12*, 497.

[30] Sworakowski, J., Pigoń, K. Trap distribution and space-charge limited currents in organic crystals. Anthracene, *J. Phys. Chem. Solids* **1969**, *30*, 491.

[31] Sworakowski, J. On the origin of trapping centres in organic molecular crystals, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1970**, *11*, 1.

[32] Ruziewicz, Z. Z zagadnień luminescencji fosforów krystalicznych, *Wiad. Chem.* **1958**, *12*, 569.

[33] Ruziewicz, Z., Fluorescence and absorption spectra of azulene in frozen crystalline solutions (in Russian), *Opt. Spectr. (USSR)*, **1963**, *15*, 357.

[34] Ruziewicz, Z., Olszowski, A., Chojnacki, H. A study of quasi-linear electronic spectra and electronic states of l-azatriphenylene, *Acta Phys. Polon.* **1968**, *34*, 801.

[35] Rohleder, J. The optical absorption anisotropy of p-nitrophenol crystals (metastable) in the first OH-overtone region (7300-5500cm^{-1}), *Spectrochim. Acta* **1961**, *17*, 1275.

[36] Rohleder, J. W., Szostak, M. Optical absorption anisotropy of p-nitroaniline single crystals in the near-infrared region, *Acta. Phys. Polon.* **1966**, *30*, 187.

[37] Luty, T., Rohleder, J. W. The near infrared quantitative spectroscopy of CH_3- groups in methyl-derivatives of benzene. *Rocz. Chem.* **1967**, *41*, 975.

[38] Rohleder, J. W., Luty, T. The "oriented gas model" and its application to the infrared spectroscopy of molecular crystals, *Mol. Cryst.* **1968**, *5*, 145.

[39] Rohleder, J. W., Jakubowski, B., Szostak, M. Thermal expansion of p-nitroaniline in the temperature interval of 290 to 380 K, *Acta Phys. Polon. A* **1971**, *40*, 777.

[40] Jarmakowicz, J., Rohleder, J. W. Anisotropy of diamagnetic susceptibility in alfa and beta p-nitrophenol crystals, *Acta Phys. Polon.* **1969**, *35*, 897.

[41] Jakubowski, B., Łaźniewski, M., Rohleder, J. W. Microcalorimetric investigations on the phase transition in pentachlorophenol, *Rocz. Chem.* **1969**, *43*, 1987.

[42] Pigoń, K.: *Reguła faz. Układy jednoskładnikowe, wielofazowe*; Ruziewicz Z., Hendrich, W. *Fotochemia* [W:] *Chemia fizyczna* (Praca zbiorowa pod red. A. Basińskiego, A. Bielańskiego, K. Gumińskiego, B. Kamieńskiego, J. Hurwica i J. Kuryłowicza), PWN, Warszawa **1963**.

[43] Kusto, W. J., Rohleder, J. W. Temperature function of birefringence and structural changes in carbazole crystal, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1979**, *55*, 151.

[44] Fulińska-Wójcik, G., Rohleder, J. W. Diamagnetic anisotropy of mixed crystals pentachlorophenol – hexachlorobenzene, *Acta Phys. Polon. A* **1974**, *45*, 3.

[45] Luty, T. On the effective molecular polarizability in molecular crystals, *Chem. Phys. Lett.* **1976**, *44*, 335.

[46] Luty, T., Szostak, M., Karwowska, E. Dichroic ratio of a group of overlapping bands in the near infrared region, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1974**, *29*, 175.

[47] Szostak, M. M. A polarized infrared and Raman spectroscopic study of the electrooptic crystal m-nitroaniline. I. Assignments of internal vibrations, *J. Raman Spectr.* **1979**, *8*, 43.

[48] Szostak, M. Elektrooptyczne własności aniliny, *Wiad. Chem.* **1979**, *33*, 363.

[49] Wójcik, G., Charbonneau, G. P., Delugeard, Y., Toupet, L. The disordered crystal structure of pentachlorothiophenol, *Acta Cryst. B* **1980**, *36*, 506.

[50] Luty, T. Energia sieci kryształów molekularnych, *Postępy Fizyki*, **1973**, *24*, 437.

[51] Luty, T. Dynamic multipoles in molecular crystals, *J. Chem. Phys.* **1977**, *66*, 1231.

[52] Luty, T. Uszyński, I. Polaritons in molecular crystals, *J. Chem. Phys.* **1980**, *72*, 1369.

[53] Luty, T. van der Avoird, A., Berns, R. M. Lattice dynamics of solid N_2, with an *ab initio* intermolecular potential, *J. Chem. Phys.* **1980**, *73*, 5305.

[54] Kuchta, B., Luty, T. Lattice dynamics of solid N_2, with an *ab initio* intermolecular potential. Hindered rotator model, *Chem. Phys. Lett.* **1982**, *92*, 462.

[55] Kuchta, B., Etters, R. D. Calculated properties of monolayer and multilayer N_2, on graphite, *Phys. Rev. B*, **1987**, *36*, 3400.

[56] Luty, T., Kuchta, B. Ground-state properties and neutral-to-ionic transformation of organic mixed-stack compounds: mean-field approximation, *Phys. Rev. B*, **1987**, *35*, 8542.

[57] Chojnacki, H., Electronic spectrum and π-electron delocalization of imidazole, *Theor. Chim. Acta*, **1968**, *12*, 373; Repulsion integral parametrization of the SCF LCAO MO CI method for nitrogen heteroaromates, *Theor. Chim. Acta*, **1968**, *11*, 174.

[58] Sokalski, W. A., Chojnacki, H. Przybliżone metody nieempiryczne do badania oddziaływań międzycząsteczkowych, *Wiad. Chem.* **1989**, *43*, 877.

[59] Chojnacki, H., Sokalski, W. A. σ-σ and π-π interactions in complementary bases, *J. Mol. Struct.* **1973**, *15*, 263.

[60] Chojnacki, H., Sokalski, W. A. Interactions of 6-thioguanine in B-DNA: possible mechanism of its mutagenic action, *J. Theor. Biol.* **1975**, *54*,167.

[61] Sokalski ,W. A., Sawaryn, A. Correlated molecular and cumulative atomic multipole moments, *J. Chem. Phys.* **1987**, *87*, 526.

[62] Sokalski, W. A. The physical nature of catalytic activity due to the molecular environment in terms of intermolecular interaction theory: derivation of simplified models, *J. Mol. Catalysis* **1985**, *30*, 395.

[63] Lipiński, J., Nowek, A, Chojnacki, H. All-valence LCAO MO SCF INDO method for ground and excited state properties, *Acta Phys. Polon. A* **1978**, *53*, 229.

[64] Lewanowicz, A., Lipiński, J., Ruziewicz, Z. Highly resolved-electronic spectra and luminescence properties of some benzo-naphthyridines at 77 K. Absorption and fluorescence spectra of 1,5-, 1,6-, and 4,6-benzo-[h]-naphthyridines, *J. Mol. Struct.* **1980**, *64*, 209.

[65] Lipiński, J. Electronic structure of platinum (II) antitumor complexes and their interactions with nucleic acid bases. *Inorg. Chim. Acta* **1988**, *152*, 151.

[66] Lipiński, J. Effect of the base sequence in DNA on double proton transfer in the guanine-cytosine and the adenine-thymine pairs, *Chem. Phys. Lett.* **1988**, *145*, 227.

[67] Galera, E., Walkowiak, W., Roszak, S., Zabża, A. A lanthanide-induced shift investigation of the conformation of pseudoionone and its derivatives in solution, *J. Mol. Struct.* **1983**, *101*, 287.

[68] Roszak, S., Keegstra, P. B., Hariharan, P. S., Kaufman, J. J. *Ab-initio* MRD-CI calculations for breaking a chemical bond in a molecule in a crystal or other solid environment. I. $H_3C\text{-}NO_2$ decomposition in nitromethane *Int. J. Quant. Chem. Quant. Chem. Symp.* **1988**, *22*, 619.

[69] Roszak, S., Buenker, R. J., Hariharan, P. C., Kaufman, J. J. *Ab intio* MRD CI ground and excited state potential curves for addition of O to $H_2C{=}CH_2$, and oxirane formation and decomposition, *Chem. Phys.* **1990**, *147*, 13.

[70] Basara, H., Ruziewicz, Z. Fluorescence and absorption spectra of 9,10-diazaphenanlhrene solutions at 77K *J. Lumin.* **1973**, *6*, 212.

[71] Basara, H., Ruziewicz, Z., Zawadzka, H. Highly resolved electronic absorption and luminescence spectra of same phenanthrolines in Shpolski matrices. Part II. Phosphorescence spectra, *J. Lumin.* **1978**, *17*, 283.

[72] Ruziewicz, Z. Quasi-liniowe widma luminescencji i absorpcji wieloatomowych drobin organicznych, *Postępy Fizyki*, **1973**, *24*, 311.

[73] Williams, J. O., Zboiński, Z. Structural imperfections and the delayed fluorescence of anthracene crystals, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II*, **1978**, *74*, 618.

[74] Munn, R. W., Luty, T., Mierzejewski, A. Crystal optics and Raman intensities, *Chem. Phys.* **1978**, *34*, 1.

[75] Szostak, M. M., Sanquer, M., Girard, A. On the role of exciton-phonon interactions in the interpretation of the relative intensities in the Roman lattice spectrum of crystalline p-chloraniline. *J. Raman Spectr.* **1981**, *11*, 449.

[76] Dove, M. T., Powell, B. M., Pawley, G. S., Chaplot, S. L., Mierzejewski A. Inelastic neutron scattering determination of phonon dispersion curves in the molecular crystal sym-$C_6F_3Cl_3$, *J. Chem. Phys.* **1989**, *90*, 1918.

[77] Szostak, M. M., Natkaniec, I. Vibronic couplings in vibrational spectra of the non-centrosymmetric 2-naphthol crystal. Comparative study of IR, Raman and inelastic incoherent neutron scattering spectra, *J. Raman Spectr.* **1989**, *20*, 493.

[78] Ecolivet, C., Mierzejewski, A. Brillouin-scattering study of the elastic anomalies at the structural phase transition in anthracene-tetracyanobenzene, *Phys. Rev. B*, **1990**, *42*, 8471.

[79] Sworakowski, J. Prądy wstrzykiwane w półprzewodnikach organicznych *Wiad. Chem.* **1968**, *22*, 443.

[80] Sworakowski, J., Thomas, J. M., Williams, D. F., Williams, J. O. Electroluminescence and enhanced double injection in crystals of anthracene *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* II, **1974**, *70*, 676.

[81] Zboiński, Z. Aparatura do pomiaru ruchliwości nośników prądu w stałych dielektrykach, *Postępy Fizyki*, **1973**, *24*, 361.

[82] Zieliński, M., Samoć, M. An investigation of the Poole-Frenkel effect by the thermally stimulated current technique, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **1977**, *10*, L105.

[83] Samoć, A., Samoć, M., Fuenfschilling, J., Zschokke-Graenacher, I. The linear Pockels effect in crystals of the iodoform-sulphur complex, *Chem. Phys. Lett.* **1985**, *114*, 423.

[84] Samoć, M., Samoć, A., Williams, D. F. Multiphoton processes of charge carrier generation in thianthrene crystals, *J. Chem. Phys.* **1982**, *76*, 3768.

[85] Samoć, M., Samoć, A., Williams, D. F. Photoconductivity of crystalline iodoform. II. Photocurrents induced by a two-photon absorption, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1981**, *78*, 15.

[86] Ecolivet, C., Miniewicz, A., Sanquer, M. Elastic constants determination in piezoelectric CT complex of carbazole - 1,3,5-trinitrobenzene by Brillouin scattering technique, *J. Phys. Chem. Solids* **1989**, *50*, 651.

[87] Nowak, R., Miniewicz, A., Samoć, M., Sworakowski, J. Thermal pulse induced dynamic pyroelectric response and piezoelectric oscillations in polyvinylidene fluoride, *Ferroelectrics* **1983**, *48*, 225.

[88] Miniewicz, A., Jakubas, R., Ecolivet, C. Ferroelasticity in $[NH_2(CH_3)_2]_3$ Sb_2Br_9(BMABA), *Ferroelectrics* **1990**, *106*, 249.

[89] Miniewicz, A., Lefebvre, J., Jakubas, C. Raman scattering in ferroelectric $[NH_2(CH_3)_2]_3$ Sb_2Br_9 (DMACA), *Ferroelectrics* **1990**, *107*, 183.

[90] Miniewicz, A. Electrooptic investigations in some molecular-ionic crystals, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1993**, *229*, 13.

[91] Miniewicz, A, Samoć, A., Sworakowski, J. Polar molecular crystals: in search of effective nonlinear optical materials, *J. Mol. Electronics* **1988**, *4*, 25.

[92] Lorenz, K., Radomska, M., Radomski, R., Świątkiewicz, J. Stałe kompleksy elektrono-donoro-akceptorowe. I. Otrzymywanie, struktura krystaliczna, własności elektryczne i magnetyczne, *Wiad. Chem.* **1971**, *25*, 269; II. Widma absorpcyjne, *Wiad. Chem.* **1971**, *25*, 349.

[93] Ashwell, G. J., Chyla, A., Heimer, N. E., Metzger R. M., Allen J. G. MeTCNQ*n*-TCNQ, a low conductivity metal above 300 K? *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1985**, *120*, 137.

[94] Pesz, K. Search for kinetic properties of solitons in polyacetylenes, *Phys. Rev. B*, **1987**, *35*, 4106.

[95] Pesz, K. Travelling solitons and polarons as non-reflecting potentials in polyacetylene, *Synth. Metals* **1988**, *26*, 327.

[96] Sworakowski, J., Orczyk, M. E. Polimeryzujące Monokryształy. Struktura, reaktywność i właściwości dielektryczne diacetylenów, *Wiad. Chem.* **1992**, *46*, 69.

[97] Pigoń, K., Ruziewicz, Z. *Chemia fizyczna*, PWN **1980**; J. Demichowicz-Pigoniowa, *Obliczenia fizykochemiczne*, PWN **1984**; J. W. Rohleder, *Fizyka chemiczna kryształów molekularnych*, PWN **1989**.

[98] Rohleder, J. W., Munn, R. W. *Magnetism and Optics of Molecular Crystals*, Wiley, **1992**.

[99] Collet, E., Lemee-Cailleau, M. H., Buron-Le Cointe, M., Cailleau, H., Wulff, M., Luty, T., Koshihara, S. Y., Meyer, M., Toupet, L., Rabiller, P., Techert, S. Laser-induced ferroelectric structural order in an organic charge-transfer crystal. *Science* **2003**, *300*, 612.

[100] Luty, T., Eckhardt, C. J. General theoretical concepts for solid state reactions: quantitative formulation of the reaction cavity, steric compression, and reaction-induced stress using an elastic multipole representation of chemical pressure. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 2441.

[101] Lemee-Cailleau, M. H., Le Cointe, M., Cailleau, H., Luty, T., Moussa, F., Roos, J., Brinkmann, D., Toudic, B., Ayache, C., Karl, N. Thermodynamics of the neutral-to-ionic transition as condensation and crystallization of charge-transfer excitations. *Phys. Rev. Lett.* **1997**, *79*, 1690.

[102] Luty, T., Ordon, P., Eckhardt, C. J. A model for mechanochemical transformations: applications to molecular hardness, instabilities, and shock initiation of reaction. *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 1775.

[103] Kuchta, B., Firlej, L. A Model Monte Carlo Simulations of the Stability of Hcp/Fcc Structures of C60 and C70 Fullerence Crystals. *Synth. Metals* **1999**, *103*, 2428.

[104] Munro, O. Q., Serth-Guzzo, J. A., Turowska-Tyrk, I. Mohanrao, K., Shokhireva, T. Kh., Walker, A. F., Debrunner, P. G., Scheidt, R. W. Two crystalline forms of low-spin $[Fe(TMP)(5\text{-}MeHIm)_2]ClO_4$: Relative parallel and perpendicular axial ligand orientations. *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 11144.

[105] Turowska-Tyrk, I., Trzop, E., Scheffer, J. R., Chen, S. Monitoring structural transformations in crystals. 8. Monitoring molecules and a reaction center during a solid-state Yang photocyclization, *Acta Cryst. B* **2006**, *62*, 128.

[106] Skarżewski, J., Wojaczyńska, E., Turowska-Tyrk, I. Sequential asymmetric dihydroxylation and sulfoxidation of homoallylic sulfides : Stereochemical aspects of the preparation of new trifunctional chiral building blocks, *Tetrahedron: Asymmetry* **2002**, *13*, 369.

[107] Neal, T. J., Kang, S-J., Turowska-Tyrk, I., Schulz, C. E., Scheidt, R. W. Magnetic interactions in the high-spin iron(III) oxooctaethylchlorinato derivative, [Fe(oxoOEC)(Cl)], and its pi-cation radical, [Fe(oxoOEC)(Cl)]-$SbCl_6$, *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 872.

[108] Gorb, L., Podolyan, Y., Dziekoński, P., Sokalski, A., Leszczynski, J. Double-proton transfer in adenine-thymine and guanine-cytosine base pairs : A Post-Hartree-Fock ab initio study, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 10119.

[109] Szefczyk, B., Mulholland, A. J., Ranaghan, K. E., Sokalski, A. Differential transition-state stabilization in enzyme catalysis: quantum chemical analysis of interactions in the chorismate mutase reaction and prediction of the optimal catalytic field, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 16148.

[110] Dyguda-Kazimierowicz, E. B., Grembecka, J., Sokalski, A., Leszczynski, J. Origins of the activity of PAL and LAP enzyme inhibitors: toward ab initio binding affinity prediction, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 1658.

[111] Lipiński, J. Sum rules for nonlinear optical properties of molecules, *Chem. Phys. Lett.* **2004**, *394*, 397.

[112] [] Lipiński, J. On the consequences of the violation of the Hellmann-Feynman theorem in calculations of electric properties of molecules, *Chem. Phys. Lett.* **2002**, *363*, 313.

[113] Palewska, K., Sujka, M., Urasińska-Wójcik, B., Sworakowski, J., Lipiński, J., Nešpůrek, S., Rakusan, J., Karaskova, M. Light-induced effects in sulfonated aluminum phthalocyanines - potential photosensitizers in the photodynamic therapy : Spectroscopic and kinetic study, *J. Photochem. Photobiol. A, Chemistry.* **2008**, *197*, 1.

[114] Komorowski, L., Lipiński, J., Szarek, P., Ordon, P. Polarization justified Fukui functions: The theory and applications for molecules, *J. Chem. Phys.* **2011**, *135*, 014109.

[115] Strasburger, K., Chojnacki, H. Helium-antihydrogen interaction: the Born-Oppenheimer potential energy curve, *Phys. Rev. Lett.* **2002**, *88*, 163201.

[116] Strasburger, K. Hydrogen-antihydrogen interaction: spectacular breakdown of the adiabatic approximation, *J. Phys. B*, **2004**, *37*, 4483.

[117] Andruniów, T., Fantacci, S., De Angelis, F., Ferre, N., Olivucci, M.: Mechanism of the initial conformational transition of a photomodulable peptide. *Angew. Chem. (Int. Ed.).* **2005**, *44*, 6077.

[118] Lumento. F., Zanirato, V., Fusi, S., Busi, E., Latterin,i L., Elisei, F., Sinicropi, A., Andruniów, T., Ferre, N., Basosi, R., Olivucci, M. Quantum chemical modeling and preparation of a biomimetic photochemical switch, *Angew. Chem. (Int. Ed.)* **2007**, *46*, 414.

[119] Sinicropi, A., Andruniów, T., Ferre, N., Basosi, R., Olivucci, M: Properties of the emitting state of the green fluorescent protein resolved at the CASPT2//CASSCF/CHARMM level, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 11534.

[120] Bernini, C., Andruniów, T., Olivucci, M., Pogni, R., Basosi, R., Sinicropi, A. Effects of the protein environment on the spectral properties of tryptophan radicals in Pseudomonas aeruginosa azuri, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 4822.

[121] Frutos, L. M., Andruniów, T., Santoro, F., Ferre, N., Olivucci, M. Tracking the excited-state time evolution of the visual pigment with multiconfigurational quantum chemistry, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* **2007**, *104*, 7764.

[122] Tarana, M., Wielgus, P., Roszak, S., Fabrikant, I. I: Effects of two vibrational modes in the dissociative electron attachment to CF_3Cl, *Phys. Rev. A.* **2009**, *79*, 052712.

[123] Cato, M. A., Majumdar, D., Roszak, S., Leszczyński, J. Exploring relative thermodynamic stabilities of formic acid and formamide dimers - role of low-frequency hydrogen-bond vibrations, *J. Chem. Theor. Comput.* **2013**, *9*, 1016.

[124] Nowakowska-Oleksy, A., Cabaj, J., Olech, K., Sołoducho, J., Roszak, S. Comparative study of alternating low-band-gap benzothiadiazole co-oligomers, *J. Fluoresc.* **2011**, *21*, 1625.

[125] Roszak. S., Kowal. M., Góra, R. The influence of the detachment of electrons on the properties and the nature of interactions in X-H_2O (X = Cl, Br) complexes, *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 3469.

[126] Bartkowiak, W, Lipiński, J. Studies of the solvent effect on the molecular hyperpolarisabilities of organic molecules. *Adv. Mater. Opt. Electron.*, **1996**, *6*, 248.

[127] Zaleśny, R., Góra, R., Kozłowska, J. J., Luis, J. M., Agren, H., Bartkowiak, W. Resonant and nonresonant hyperpolarizabilities of spatially confined molecules: a case study of cyanoacetylene, *J. Chem. Theory Comput.* **2013**, *9*, 3463.

[128] Murugan, N. A., Zaleśny, R., Kongsted, J., Agren, H. Chelation-induced quenching of two-photon absorption of azacrown ether substituted distyryl benzene for metal ion sensing, *J. Chem. Theory Comput.* **2014**, *10*, 778.

[129] Janus, K., Sworakowski, J. Photochromism of crown ethers with incorporated azobenzene moiety, *J. Phys. Chem. B.* **2005**, *109*, 93.

[130] Matczyszyn, K., Sworakowski, J. Phase change in azobenzene derivative-doped liquid crystal controlled by the photochromic reaction of the dye, *J. Phys. Chem. B.* **2003**, *107*, 6039.

[131] Matczyszyn, K., Chwialkowska, A., Sworakowski, J. Photochromic reaction-induced changes of ordering in liquid crystalline films. *Thin Solid Films.* **2008**, *516*, 8899.

[132] Miniewicz, A., Parka, J., Bartkiewicz, S., Januszko, A. Liquid crystals as materials for real-time holographic optical devices, *Pure and Applied Optics.* **1998**, *7*, 179.

[133] Miniewicz, A., Gniewek, A., Parka. J. Liquid crystals for photonic applications. *Optical Materials (Amsterdam)*, **2003**, *21*, 605.

[134] Miniewicz, A., Komorowska, K., Vanhanen, J., Parka, J. Surface-assisted optical storage in a nematic liquid crystal cell via photoinduced charge-density modulation, *Organic Electronics* **2001**, *2*, 155.

[135] Karpiński, P., Miniewicz, A. Surface plasmon polariton excitation in metallic layer via surface relief gratings in photoactive polymer studied by the finite-difference time-domain method, *Plasmonics* **2011**, *6*, 541.

[136] Bartkiewicz, S., Miniewicz, A., Sahraoui, B., Kajzar, F. Dynamic charge-carrier-mobility-mediated holography in thin layers of photoconducting polymers, *Appl. Phys. Lett.* **2002**, *81*, 3705.

[137] Myśliwiec, J., Miniewicz, A., Bartkiewicz, S. Influence of light on self-diffraction process in liquid crystal cells with photoconducting polymeric layers, *Opto-Electronics Review* **2002**, *10*, 53.

[138] Sobolewska, A. M., Miniewicz, A. Analysis of the kinetics of diffraction efficiency during the holographic grating recording in azobenzene functionalized polymers, *J. Phys. Chem. B*, **2007**, *111*, 1536.

[139] Green, K. A., Cifuentes, M. P., Corkery, C. T., Samoć, M., Humphrey, M. G. Switching the cubic nonlinear optical properties of an electro-, halo-, and photochromic ruthenium alkynyl complex across six states, *Angew. Chem. (Int. Ed.).* **2009**, *48*, 7867.

[140] Zhang, C., Matsumoto, T., Samoć, M., Petrie, S., Meng, S., Corkery, C. T., Stranger, R., Zhang, J., Humphrey, M. G., Tatsumi, K: Dodecanuclear-ellipse and decanuclear-wheel nickel(II) thiolato clusters with efficient femtosecond nonlinear absorption, *Angew. Chem. (Int. Ed.).* **2010**, *49*, 4209.

[141] Babgi, B., Rigamonti, L., Cifuentes, M. P., Corkery, C. T., Randles, M. D., Schwich, T., Petrie, S., Stranger, R., Teshome, A., Asselberghs, I., Clays, K., Samoć, M., Humphrey, M. G. Length-dependent convergence and saturation behavior of electrochemical, linear optical, quadratic nonlinear optical, and cubic nonlinear optical properties of dipolar alkynylruthenium complexes with oligo(phenyleneethynylene) bridges, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 10293.

[142] Coe, B. J., Fielden, J., Foxon, S. P., Brunschwig, B. S., Asselberghs, I., Clays, K., Samoć, A., Samoć, M. Combining very large quadratic and cubic nonlinear optical responses in exten-

ded, tris-chelate metallochromophores with six π-conjugated pyridinium substituents, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 3496.

[143] He Guang, S., Zhu, J., Baev, A., Samoć, M., Frattarelli, D. L., Watanabe, N., Facchetti, A., Agren, H., Marks, T. J., Prasad, P. N. Twisted π-system chromophores for all-optical switching, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 6675.

[144] Nyk, M. W., Wawrzyńczyk, D. M., Parjaszewski, K., Samoć, M. Spectrally resolved nonlinear optical response of upconversion lanthanide-doped $NaYF_4$ nanoparticles, *J. Phys. Chem. C.* **2011**, *115*, 16849.

[145] Gordel, M., Olesiak-Bańska, J., Matczyszyn, K., Nogues, C., Buckle, M., Samoć, M. Post-synthesis reshaping of gold nanorods using a femtosecond laser, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 71.

[146] Wawrzyńczyk, D. M., Nyk, M. W., Bednarkiewicz, A., Stręk, W., Samoć, M. Morphology- and size-dependent spectroscopic properties of Eu^{3+}-doped Gd_2O_3 colloidal nanocrystals, *J. Nanoparticle Research* **2014**, *16*, 2690.

[147] Matczyszyn, K., Olesiak-Bańska, J. DNA as scaffolding for nanophotonic structures, *J. Nanophotonics*, **2012**, *6*, 064505.

[148] Miniewicz, A., Kochalska, A., Myśliwiec, J., Samoć, A., Samoć, M., Grote, J. G. Deoxyribonucleic acid-based photochromic material for fast dynamic holography, *Appl. Phys. Lett.* **2007**, *91*, 041118.

[149] Olesiak-Bańska, J., Matczyszyn, K., Zaleśny, R., Murugan, N. A., Kongsted, J., Agren, H., Bartkowiak, W., Samoć, M. Revealing spectral features in two-photon absorption spectrum of Hoechst 33342: a combined experimental and quantum-chemical study, *J. Phys. Chem. B.* **2013**, *117*, 12013.

[150] Bazylińska, U. J., Drozdek, S., Nyk, M. W., Kulbacka, J., Samoć, M., Wilk, K. Core/shell quantum dots encapsulated in biocompatible oil-core nanocarriers as two-photon fluorescent markers for bioimaging, *Langmuir* **2014**, 30, 14931.

[151] Sworakowski, J. Piezoelectricity, Pyroelectricity and Ferroeletricity, [W:] *Molecular Electronics* [Red. G. J. Ashwell], Wiley **1992**.

[152] Luty, T., Eckhardt, C. J: Cooperative effects in solid-state reaction [W:] *Reactivity of molecular solids.* [Red. E. Boldyreva, V. Boldyrev]. Wiley, Chichester **1999**.

[153] Radosiński, Ł., Nasu, K., Kanazaki, J., Tanimura, K., Radosz, A., Luty, T. Nano-scale sp^2-sp^3 conversion by visible lights irradiation and photoinduced phase transitions. [W:] *Molecular electronic and related materials-control and probe with light.* [Red. T. Naito]. Transworld Research Network, Trivandrum **2010**.

[154] Humphrey, M. G., Schwich, T., West, P. J., Cifuentes, M. P., Samoć, M: Nonlinear optical properties of coordination and organometallic complexes. [W:] *Comprehensive inorganic chemistry 2: from elements to applications. Vol. 8, Coordination and organometallic chemistry.* [Red. J. Reedijk, K. Poeppelmeier]. 2nd ed. Elsevier, Amsterdam **2013**.

[155] Bartkowiak, W., Zaleśny, R. SOS methods in calculations of electronic NLO properties. [W:] *Non-linear optical properties of matter. From molecules to condensed phases.* [Red. M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej, J. Leszczyński]. Springer, Dordrecht **2006**. (*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics,* vol. 1)

[156] Bertault, M., Even, J., Sworakowski, J. The various aspect of polymerization reaction in diacetylene crystals [W:] *Recent research developments in polymer science.* Vol. 3. Pt. 1. [Red. S. G. Pandalai]. Transworld Research Network, Trivandrum **1999**.

[157] Roszak, S., Leszczynski, J. Clusters, the intermediate state of matter [W:] *Computational materials science.* [Red. J. Leszczynski]. Elsevier, Amsterdam **2004**. (*Theoretical and Computational Chemistry;* vol. 15)

[158] Roszak, S., Leszczynski, J. Ionic clusters with weakly interacting components - magic numbers rationalized by the shell structure [W:] *Computational chemistry. Review of current trends.* Vol. 6. [Red. J. Leszczynski]. World Scientific, Singapore **2001**.

[159] Sworakowski, J., Chyla, A., Bieńkowski, M. Formation, and electrical and optical properties of multi-component Langmuir-Blodgett films containing poly(3-n-alkylthiophenes) [W:] *Photoactive Organic Materials: Science and Applications* [Red: F. Kajzar, V.M. Agranovich, C.Y.-C. Lee], Kluwer Acad. Publ., Dordrecht **1996**.

[160] Eckhardt, C. J., Luty, T. A solid-state approach to Langmuir monolayers, their phases, phase transitions, and design [W:] *Handbook of thin film materials.* Vol. 2 *Characterization and spectroscopy of thin films*. [Red. H. S. Nalwa]. Academic Press, San Diego **2002**.

[161] Wielgus, M. E., Bartkowiak, W. Solvent effects on the two-photon absorption cross-section of organic molecules [W:] *Handbook of solvents.* Vol. 1, *Properties.* [Red. G. Wypych]. ChemTec Publishing, Toronto **2014**.

[162] Bartkowiak, W.: Solvatochromism and nonlinear optical properties of donor-acceptor pi-conjugated molecules. [W:] *Non-linear optical properties of matter. From molecules to condensed phases.* [Red. M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej, J. Leszczyński]. Springer, Dordrecht **2006**. (*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics,* vol. 1)

[163] Toczek, D., Klepacz, E., Roszak, S., Gancarz, R.: Polyphenol glycosides as potential remedies in kidney stones therapy: experimental research supported by computational studies [W:] *Application of computational techniques in pharmacy and medicine.* [Red. L. Gorb, Vi. Kuz'min, E. Muratov]. Springer, Dordrecht **2014**. (*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics,* vol. 17).

[164] Olsztyńska-Janus, S., Gąsior-Głogowska, M. E., Szymborska-Małek, K., Czarnik-Matusewicz, B., Komorowska, M.: Specific applications of vibrational spectroscopy in biomedical engineering. [W:] *Biomedical engineering, trends, research and technologies.* [Red. M. Komorowska and S. Olsztyńska-Janus]. InTech, Rijeka **2011**.

[165] Komorowski, L. Hardness Indices for Free and Bonded Atoms, [W:] *Chemical hardness* [Red. K. D. Sen]. *Structure and Bonding*, vol. 80, Springer, Berlin **1993**.

[166] Zaleśny, R., Papadopoulos, M. G., Mezey, P. G., Leszczyński, J. Linear - scaling techniques in computational chemistry and physics : methods and applications. [Red. R. Zaleśny]. Springer, Dordrecht **2011**. (*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics;* vol. 13)

[167] Majumdar, D., Roszak, S., Leszczynski, J.: Relativistic symmetries in the electronic structure and properties of molecules. [W:] *Relativistic methods for chemists.* [Red. M. Barysz, Y. Ishikawa]. Springer, Dordrecht **2010**.

[168] Strasburger, K., Wołcyrz, M.: Variational calculations on positronic bound states. [W:] *Explicitly correlated wavefunctions.* [Red. E. A. G. Armour, J. Franz, J. Tennyson]. *Collaborative Computational Project on Molecular Quantum Dynamics* (CCP6), Daresbury **2006**.

[169] Sokalski, A. [Red.]: Molecular materials with specific interactions - modeling and design. Springer, Dordrecht **2007**. (*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics;* vol. 4).

[170] Miniewicz, A., Renugopalakrishnan, V.: Synthetic photorefractive and photochromic materials and their comparison with bacteriorhodopsin mutants for optical information processing. [W:] *Bionanotechnology: proteins to nanodevices.* [Red. V. Renugopalakrishnan, R. V. Lewis]. Springer, Dordrecht **2006**.

[171] Berlicki, Ł., Grembecka, J., Dyguda-Kazimierowicz, E. B., Kafarski, P., Sokalski, A.: From inhibitors of LAP to inhibitors of PAL: lessons from molecular modeling and experiment interface. [W:] *Molecular materials with specific interactions - modeling and design.* [Red. W. A. Sokalski]. Springer, Dordrecht **2007**. (*Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics,* vol. 4.)

[172] Sokalski, A., Kędzierski, P., Grembecka, J., Dziekoński, P., Strasburger, K.: Theoretical tools for analysis and modelling electrostatic effects in biomolecules [W:] *Computational molecular biology.* [Red. J. Leszczyński]. Elsevier, Amsterdam **1999**. (*Theoretical and Computational Chemistry,* vol. 8.)

[173] *Chemia fizyczna.* Tom 1: *Podstawy fenomenologiczne.* [Red. L. Komorowski, J. Lipiński]. Tom 2: *Fizykochemia molekularna.* [Red. L. Komorowski, J. Lipiński]. Tom 3: *Obliczenia fizykochemiczne.* [Red. A. Olszowski, L. Komorowski]. Tom 4: *Laboratorium fizykochemiczne* [Red. L. Komorowski, A. Olszowski], Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa **2005-2013**.

[174] Roztocki, K., Formalik, F., Krawczuk, A., Senkovska, I., Kuchta, B., Kaskel, S., Matoga, D. Mechanistic Understanding towards Threshold Sensing Architectures, *Angew. Chem. (Int. Ed.)* **2020**, *59*, 23371.

[175] Roztocki, K., Formalik, F., Krawczuk, A., Senkovska, I., Kuchta, B., Kaskel, S., Matoga, D. Collective Breathing in an Eightfold Interpenetrated Metal-Organic Framework: From Mechanistic Understanding towards Threshold Sensing Architectures, *Angew. Chem. (Int. Ed.)* **2020**, 59, 4491.

[176] Kuchta, B., Dundar, E., Formalik, F., Llewellyn, P. L., Firlej, L. Adsorption-Induced Structural Phase Transformation in Nanopores, *Angew. Chem. (Int. Ed.)* **2017**, *56*, 16243.

[177] Medishetty, R., Nemec, L., Nalla, V., Henke, S., Samoc, M., Reuter, K., Fischer, R. A. Multi-Photon Absorption in Metal-Organic Frameworks, *Angew. Chem. (Int. Ed.)* **2017**, *56*, 14743.

[178] Xu, J., Tsanakopoulou, M., Magnani, C. J., Szabla, R., Sponer, J. E., Sponer, J., Gora, R. W., Sutherland, J. D. A prebiotically plausible synthesis of pyrimidine β-ribonucleosides and their phosphate derivatives involving photoanomerization, *Nature Chemistry* **2017**, *9*, 303.

[179] Xu, J., Chmela, V., Green, N. J., Russell, D. A., Janicki, M. J., Gora, R. W., Szabla, R., Bond, A. D., Sutherland, J. D. Selective prebiotic formation of RNA pyrimidine and DNA purine nucleosides, *Nature* **2020**, *582*, 60.

[180] Zafra, J. L., Molina Ontoria, A., Mayorga Burrezo, P., Pena-Alvarez, M., Samoc, M., Szeremeta, J., Ramirez, F. J., Lovander, M. D., Droske, C. J., Pappenfus, T. M., *et al.* Linearly Extended [2.2]Paracyclophanes, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 3095.

[181] Olesiak-Banska, J., Waszkielewicz, M., Obstarczyk, P., Samoc, M. Two-photon absorption and photoluminescence of colloidal gold nanoparticles and nanoclusters, *Chem. Soc. Rev.* **2019**, *48*, 4087.

[182] Medishetty, R., Zareba, J. K., Mayer, D., Samoc, M., Fischer, R. A. Nonlinear optical properties, upconversion and lasing in metal-organic frameworks, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, 4976.

[183] Grande, V., Shen, C-A., Deiana, M., Dudek, M., Olesiak-Banska, J., Matczyszyn, K., Wuerthner, F. Selective parallel G-quadruplex recognition by a NIR-to-NIR two-photon squaraine, *Chemical Science* **2018**, *9*, 8375.

[184] Lutsyk, P., Janus, K., Sworakowski, J., Kochalska, A., Nešpůrek, S. Kinetic study of light-driven processes in photochromic dye-doped polymers used as gate insulators in photoswitchable organic field effect transistors, *Chem. Phys.* **2012**, *404*, 22.

[185] Sworakowski, J., Current-voltage characteristics in organic field-effect transistors. Effect of interface dipoles, *Chem. Phys.* **2015**, *456*, 106.

[186] Miniewicz, A., Bartkiewicz, S., Orlikowska, H., Dradrach, K. Marangoni effect visualized in two dimensions optical tweezers for gas bubbles, *Scientific Reports* **2016**, *6*, 34787.

[187] Bąkowicz, J., Turowska-Tyrk, I. Structural transformations in crystals induced by radiation and pressure. Part 4. The complex influence of high pressure on the path and kinetics of the [2+2] photodimerization, *CrystEngComm*, **2016**, *18*, 8898.

[188] Chlebosz, D., Janasz, Ł., Pisula, W., Kiersnowski, A. Relationship between crystalline structure of poly(3-hexylthiophene) blends and properties of organic thin-film transistors - a brief review. *Polimery* **2016**, *61*, 433.

[189] Reis, H.; Lauvergnat, D.; Luis, J. M.; Zaleśny, R. Vibrational Linear and Nonlinear Optical Properties: Theory, Methods, and Application. [W:] *Frontiers of quantum chemistry* [Red. M. J. Wójcik, H. Nakatsuji, B. Kirtman, Y. Ozaki] Springer Nature, Singapore **2018**, 401.

[190] Medved, M.; Budzák, Š.; Bartkowiak, W.; Reis, H. Solvent Effects on Molecular Electric Properties. [W:] *Handbook of computational chemistry* [Red. J. Leszczynski]; Springer Science+Business Media: Dordrecht, **2016**, 1.

[191] Ordon, P., Komorowski, L. Monitoring the evolution of the electron density in atoms and bonds by the reaction fragility spectra [W:] *Chemical Reactivity. Theories, Principles and Approaches.* [S. Kaya, L. von Szentpaly, G. Serdaroğlu, L. Guo] Elsevier **2022**, in press.

[192] Quintana, C., Morshedi, M., Du, J., Morrall, J. P. L., Zareba, J. K., Samoc, M., Cifuentes, M. P. Humphrey, M. G., Hybrids of gold nanoparticles and oligo(p-phenyleneethynylene)s end-functionalized with alkynyl-ruthenium groups: Outstanding two-photon absorption in the second biological window, *Nano Research* **2020**, *13*, 2755.

[193] Lu, D., Labrador-Paez, L., Ortiz-Rivero, E., Frades, P., Antoniak, M. A., Wawrzynczyk, D., Nyk, M., Brites, C. D. S., Carlos, L. D., Garcia, S., Jose A., *et al.*, Exploring Single-Nanoparticle Dynamics at High Temperature by Optical Tweezers, *Nano Letters* **2020**, *20*, 8024.

[194] Pilch, A., Wuerth, C., Kaiser, M., Wawrzynczyk, D., Kurnatowska, M., Arabasz, S., Prorok, K., Samoc, M., Strek, W., Resch-Genger, U., *et al.*, Bioimaging: Shaping Luminescent Properties of Yb and Ho Co-Doped Upconverting Core-Shell β- NaYF Nanoparticles by Dopant Distribution and Spacing, *Small* **2017**, *13*, 47.

[195] Lim, C-K., Maldonado, M., Zalesny, R., Valiev, R., Aagren, H., Gomes, A. S. L., Jiang, J., Pachter, R., Prasad, P. N. Interlayer-Sensitized Linear and Nonlinear Photoluminescence of Quasi-2D Hybrid Perovskites Using Aggregation-Induced Enhanced Emission Active Organic Cation Layers, *Advanced Functional Materials* **2020**, *30*, 1909375.

[196] Persano, L., Szukalski, A., Gaio, M., Moffa, M., Salvadori, G., Sznitko, L., Camposeo, A., Mysliwiec, J., Sapienza, R., Mennucci, B., *et al.* Dye Stabilization and Wavelength Tunability in Lasing Fibers Based on DNA, *Advanced Optical Materials* **2020**, *8*, 2001039.

[197] Antoniak, M. A., Bazylinska, U., Wawrzynczyk, D., Cwierzona, M., Mackowski, S., Piatkowski, D., Kulbacka, J., Nyk, M. Enhancing optical functionality by co-loading NaYF :Yb,Er and CdSe QDs in a single core-shell nanocapsule, *J. Mater. Chem. C: Materials for Optical and Electronic Devices* **2020**, *8*, 14796.

[198] Zalesny, R., Alam, M. Md., Day, P. N., Nguyen, K. A., Pachter, R., Lim, C-K., Prasad, P. N., Agren, H. Computational design of two-photon active organic molecules for infrared responsive materials, *J. Mater. Chem. C: Materials for Optical and Electronic Devices* **2020**, *8*, 9867.

[199] Deiana, M., Pokladek, Z., Matczyszyn, K., Mlynarz, P., Buckle, M., Samoc, M. Effective control of the intrinsic DNA morphology by photosensitive polyamines, *J. Mater. Chem. B: Materials for Biology and Medicine* **2017**, *5*, 1028.

[200] Mayer, D. C., Zareba, J. K., Raudaschl-Sieber, G., Poethig, A., Choluj, M., Zalesny, R., Samoc, M., Fischer, R. A. Layered Metal-Organic Frameworks, *Chem. Mater.* **2020**, 32, 5682.

[201] Formalik, F., Neimark, A. V., Rogacka, J., Firlej, L., Kuchta, B. Pore opening and breathing transitions in metal-organic frameworks: Coupling adsorption and deformation, *J. Coll. Interf. Sci.* **2020**, *578*, 77.

[202] L. Komorowski, Między kulturą współpracy a kultem sukcesu, Debaty PAU 2019, VI, 62. http://pau.krakow.pl/Debaty_PAU/T_VI/Debaty_PAU_VI_m3_Komorowski.pdf