

Wydział Chemii  
 Uniwersytet Wrocławski  
 Fryderyka Joliot-Curie 14  
 50-383 Wrocław

**DZIAŁ 15: Informacja o najważniejszych osiągnięciach jednostki w okresie objętym ankietą w zakresie pozostałych efektów działalności naukowej i artystycznej**

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
1	Obserwacja przegrupowania porfirynoidów indukowanych jonami metali	<p>Porfirynoidy stanowią jedną z najintensywniej eksplorowanych grup chromoforów organicznych. Zainteresowanie tymi związkami wynika z ich przestrajalnych właściwości optycznych, elektrochemicznych i magnetycznych, możliwych zastosowań w chemii supramolekularnej, oraz nietrywialnej reaktywności. Benziporfiryny, analogi porfiryn zawierające pierścień fenylenowy w miejscu jednego z piroli, ulegają indukowanym jonami metali reakcjom przegrupowania do pochodnych karbaporfiryn. W szczególności, kontrakcje pierścienia sześciocząłowego zaobserwowano dla szeregu jonów metali przejściowych, m.in. dla złota(III) (Chem. Eur. J. 2014, 13 cytowań, 10.1002/chem.201304162) i rodu(III) (Chem. Eur. J. 2015, 3 cytowania, 10.1002/chem.201501996; Angew. Chem. 2016, 10.1002/anie.201508033).</p> <p>Obserwowana reaktywność ma fundamentalne znaczenie poznawcze, ze względu na unikalny charakter reakcji zachodzących w rdzeniu porfirynoidu, oraz uzyskiwany w tych badaniach wgląd w mechanizm indukowanych metalem przegrupowań.</p> <p>Powyższe wyniki uzyskane zostały w zespole prof. L. Latosa-Grażyńskiego, jednego z najlepiej cytowanych polskich chemików. Aktywność zespołu doprowadziła do znaczących rezultatów w innych istotnych obszarach chemii porfirynoidów, obejmujących m.in. syntezę zwężonych i rozszerzonych porfiryn, karbaporfiryn i ich pochodnych, chemię koordynacyjną oraz badania nad aromatycznością porfirynoidów. O znaczeniu tych wyników świadczy m.in. ranga czasopism, w których ukazały się prace zespołu: wystarczy zauważyć, że w latach 2013-2016 prof. Grażyński opublikował wraz ze współpracownikami 8 artykułów w samym tylko Angewandte Chemie. Badania zespołu wspierane są przez Narodowe Centrum Nauki (m.in. granty MAESTRO oraz OPUS).</p>	Obszar nauk ścisłych

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
2	Odkrycie nowych, funkcjonalnych ferroelektryków organicznych	<p>Materiały ferroiczne, tzn. posiadające dwa stabilne stany orientacyjne, które można przełączać czynnikiem zewnętrznym, mają szereg istotnych zastosowań w elektronice. Głównym osiągnięciem Wydziału w badaniach nad materiałami ferroicznymi było odkrycie ferroelektryczności w bromku diizopropylamoniowym, dokonane przez dr A. Piechę-Bisiorek, pracującą w zespole prof. R. Jakubasa (CrystEngComm 2013, IF 3.86, 24 cytowania, 10.1039/C2CE26580J). Niezależne doniesienie na ten sam temat zostało opublikowane przez grupę R.-G. Xiong w czasopiśmie Science, co wskazuje na światową rangę tego dokonania. Bromek diizopropylamoniowy charakteryzuje się spektakularną wartością polaryzacji spontanicznej, porównywalną z tytanianem baru, wysoką temperaturą Curie (425 K), oraz szeregiem innych właściwości ważnych z aplikacyjnego punktu widzenia. W dalszych badaniach materiał ten sklasyfikowany został jako niewłaściwy ferroelektryk i niewłaściwy ferroelastyk (Advanced Materials, IF 18.96, 10.1002/adma.201501812). Badania prowadzone były w ramach projektu NCN SONATA.</p> <p>Powyższe osiągnięcie wpisuje się w nurt badań nad materiałami ferroicznymi prowadzonych od lat przez Zespół prof. Jakubasa. Jako uznany ekspert w dziedzinie, angażuje się on w szereg współprac badawczych, m.in. z grupą prof. Stoddarta, noblisty z 2016 r. Ta ostatnia współpraca zaowocowała dotąd otrzymaniem elastycznych ferroelektrycznych kryształów organicznych na bazie haloimidazoli (Nature Communications 2016, 10.1038/ncomms13108). Elastyczność tych kryształów jest niewątpliwym atutem z punktu widzenia potencjalnych zastosowań, gdyż może pozwolić na zastąpienie takimi materiałami stosowanych obecnie elastycznych ferroelektryków polimerowych.</p>	Obszar nauk ścisłych
3	Odkrycie złożonych mechanochemicznych procesów rozpadu mostków disiarczkowych	<p>Mechaniczna aktywacja rozszczepienia wiązań dwusiarczkowych odgrywa istotną rolę zarówno w procesach biochemicznych, np. w regulacji aktywności białek, jak i technicznych, takich jak zachowanie wulkanizowanych materiałów pod wpływem naprężeń. Symulacje ab initio prowadzone przez dr. Przemysława Dopieralskiego we współpracy z zespołem prof. D. Marxa, pozwoliły w ostatnim czasie na dogłębne zrozumienie efektów konformacyjnych w procesach rozszczepienia mostków disulfidowych i opisanie mechanizmu mechanochemicznej aktywacji. Wiodąca praca poświęcona temu zagadnieniu ukazała się w 2013 r. Nature Chemistry (IF 23.30, 10.1038/nchem.1676) i była dotąd cytowana 33 razy.</p>	Obszar nauk ścisłych

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
		<p>W dalszych badaniach wykazano, że pod wpływem przyłożonej siły może nastąpić również zmiana mechanizmu w powiązanej reakcji beta-eliminacji disiarczków (Angew. Chem. 2016, IF 11.71, 3 cytowania, 10.1002/anie.201508005). Najnowsza praca z tego obszaru, przedstawiająca złożoną zależność mechanizmu rozszczepienia wiązań dwusiarczkowych w warunkach zasadowych od działania siły zewnętrznej, została niedawno opublikowana w Nature Chemistry (10.1038/nchem.2632, online 24.10.2016).</p> <p>Dr P. Dopieralski jest wybijającym się chemikiem-teoretykiem młodego pokolenia, specjalizującym się w badaniach metodami dynamiki molekularnej. Jest związany z zespołem prof. Zdzisława Latajki, specjalizującym się od lat w teoretycznych badaniach reaktywności i oddziaływań międzycząsteczkowych. Dr Dopieralski kieruje obecnie projektem NCN OPUS, którego celem jest pogłębienie zrozumienia mechanochemii disiarczków.</p>	
4	Opracowanie nowych katalizatorów palladowych o wysokiej aktywności w reakcjach sprzęgania	<p>Rozwój metod katalitycznych wykorzystujących metale przejściowe jest jednym z najważniejszych nurtów współczesnej chemii. Metody te w ciągu ostatniego półwiecza zrewolucjonizowały syntezę organiczną, dostarczając wydajnych i selektywnych reakcji sprzęgania, metatezy i utlenienia/redukcji. Wiodącym osiągnięciem Wydziału w obszarze katalizy było opracowanie nowej klasy katalizatorów palladowych zawierających ligandy karbenowe o niewielkiej zawadzie sterycznej (A.M. Trzeciak i in., ChemCatChem 2013, IF 5.04, 17 cytowań, 10.1002/cctc.201200428). Katalizatory te wykazywały nadzwyczajną aktywność w reakcjach sprzęgania Suzukiego, zapewniając wartości TN do 760 000. Udowodniono, że w stanie spoczynkowym katalizatory te tworzą struktury nanocząstkowe, które uwalniają do roztworu molekularne formy aktywne. Zespół badawczy prof. A. Trzeciak, w którym opracowano powyższy układ katalityczny, jest jedną z czołowych polskich grup specjalizujących się w katalizie homo- i heterogenicznej. Zespół wprowadził w ostatnim okresie szereg nowych rozwiązań, takich jak katalizatory Pd immobilizowane na nośnikach polisiloksanowych (Appl. Cat. A 2014, IF 3.94, 14 cytowań, 10.1016/j.apcata.2013.10.032), mieszanych podłożach tlenkowych (J. Cat. 2014, 10.1016/j.jcat.2014.08.007, IF 6.92, 9 cytowań), czy materiałach typu MOF (Dalton Trans. 2016, IF 4.18, 1 cytowanie, 10.1039/C6DT02242A). Warty uwagi osiągnięciem jest układ katalityczny wykorzystujący chiralne ciecze jonowe, zapewniający doskonałą enancjoselektywność (&gt; 99% ee) w reakcjach asymetrycznego arylowania Hecka (Dalton Trans. 2013, IF 4.10, 9 cytowań, 10.1039/C2DT31672B).</p>	Obszar nauk ścisłych

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
		Badania Zespołu są finansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (2 projekty OPUS).	
5	Organizacja Konferencji Chemii Koordynacyjnej ISMEC 2015	<p>Konferencja International Symposium on Metal Complexes jest jednym z najważniejszych sympozjów poświęconych termodynamice kompleksów metali i ogólnej chemii koordynacyjnej, z tradycjami sięgającymi 1974 r. W roku 2015 konferencja ISMEC została zorganizowana przez Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego. Rolę przewodniczącego komitetu naukowego pełnił prof. H. Kozłowski, a rolę przewodniczącego komitetu organizacyjnego – dr hab. E. Gumienna-Kontecka. Sympozjum przyciągnęło 103 uczestników z 57 instytucji, w tym 73 gości zagranicznych z 20 krajów świata oraz 27 doktorantów. Wykłady plenarne wygłosili Enzo Alessio (Triest), Merce Capdevila (Barcelona), Christoph Fahrni (Atlanta, USA), Bernard Meunier (Tuluza, France), Edit Y. Tshuva (Jerozolima), oraz Daniela Valensin (Siena). Tematyka wystąpień obejmowała zagadnienia termodynamiki kompleksów, równowagi w roztworach, oddziaływania metali z biomolekułami, transport, homeostazę i toksyczność metali, leki oparte o kompleksy metali, metody analityczne, nanostruktury, proteomikę i metabolomikę, chemię supramolekularną oraz obliczeniową.</p> <p>Sympozjum ISMEC jest jedną z kilku konferencji związanych z tematyką chemii bionieorganicznej zorganizowanych w latach 2013-2016 na Wydziale Chemii. Zespół Chemii Bionieorganicznej prof. Kozłowskiego zorganizował dwie edycje International Symposium on Inorganic Biochemistry (w roku 2013 i 2015). Konferencje z tego cyklu mają podobną skalę co sympozjum ISMEC (ok. 90 uczestników) i równie silnie zaznaczony międzynarodowy charakter.</p>	Obszar nauk ścisłych
6	Organizacja konferencji chemii nieorganicznej EICC-3	<p>EuCheMS Inorganic Chemistry Conference (EICC) jest serią prestiżowych sympozjów zainicjowaną w roku 2011 przez Oddział Chemii Nieorganicznej Europejskiego Stowarzyszenia Nauk Chemicznych i Molekularnych (EuChemMS). EuChemMS reprezentuje ponad 160 000 chemików zrzeszonych w 41 organizacjach europejskich. Trzecia edycja EICC została zorganizowana w r. 2015 samodzielnie przez Wydział Chemii UW r pod patronatem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz władz samorządowych Wrocławia i Dolnego Śląska. Przewodniczącą komitetu naukowego była prof. Anna M. Trzeciak, dziekan Wydziału Chemii.</p> <p>Bogaty program konferencji obejmował wszystkie wiodące działy chemii nieorganicznej, w tym chemię bionieorganiczną i badania nad metaloenzymami, chemię metaloorganiczną i katalizę, chemię materiałów,</p>	Obszar nauk ścisłych

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
		nanocząstki i nanokatalizę, konwersję energii i fotochemię, chemię supramolekularną, a także mechanizmy reakcji i badania teoretyczne. Wykłady plenarne wygłosili B. Chaudret (INSA Toulouse), Z. Gross (Technion), L. Latos-Grażyński (UWr), S. Lidin (LTH Lunds) i X. Zou (Sztokholm). Konferencja EICC-3 zgromadziła 212 uczestników z 34 krajów, w tym 84 doktorantów, którzy wysłuchali 107 wykładów i uczestniczyli w dwóch sesjach posterowych.	
7	Organizacja konferencji HBond2015	International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research (HBond) zorganizowana w 2015 r. przez Wydział Chemii była 21. sympozjum z tego cyklu. Seria HBond została zainicjowana w r. 1977 przez prof. Lucjana Sobczyka na Wydziale Chemii UWr: kolejne edycje organizowane były co dwa lata w całej Europie. Przewodniczącym komitetu organizacyjnego obecnej edycji był prof. Zdzisław Latajka z Wydziału Chemii UWr, jeden z wiodących specjalistów w dziedzinie teorii wiązania wodorowego i oddziaływań międzycząsteczkowych. Konferencja HBond2015 gościła ponad 100 specjalistów w dziedzinie fizykochemii wiązania wodorowego i poświęcona była różnorodnym zagadnieniom obejmującym spektroskopię, teorię, chemię supramolekularną i biochemię układów z wiązaniem wodorowym i halogenowym. Wykład otwarcia „From supramolecular chemistry towards adaptive chemistry: Aspects of hydrogen bonding” został wygłoszony przez J.-M. Lehna, laureata nagrody Nobla z 1987 r. i twórcę chemii supramolekularnej. Konferencja HBond stanowiła część szerszego programu konferencyjnego Wydziału Chemii w obszarze chemii fizycznej. W latach 2013, 2014 i 2016 zorganizowane zostały trzy edycje cieszącego się dużą popularnością symposium Central European School on Physical Organic Chemistry.	Obszar nauk ścisłych
8	Osiągnięcia w obszarze chemii bionieorganicznej w ramach konsorcjum WCB KNOW	Wydział Chemii jest jednym z najsilniejszych europejskich ośrodków prowadzących badania w obszarze chemii bionieorganicznej. Badania nad biochemicznymi i biomedycznymi właściwościami kompleksów metali zainicjował w latach 70 XX wieku prof. Henryk Kozłowski, rozwijając rozległy program badawczy, realizowany w szerokiej współpracy międzynarodowej. Istotnym wzmocnieniem tego obszaru aktywności naukowej jest członkostwo Wydziału we Wrocławskim Centrum Biotechnologii, które uzyskało status KNOW na lata 2014-2018. Udział w WCB pozwolił ponadto na poszerzenie oferty dydaktycznej o nowe, oryginalne kierunki studiów I stopnia, „Chemia i toksykologia sądowa” oraz „Chemia Medyczna”. Poszukiwanie bioaktywnych kompleksów metali, stanowiące jest jednym z	Obszar nauk ścisłych

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
		<p>głównych nurtów badań biomedycznych na Wydziale, zaowocowało w ocenianym okresie syntezą nowych kompleksów srebra(I) z 1,3,5-triaza-5-fosfaadamantanem, wykazujących nadzwyczajną aktywność antybakteryjną i antyproliferacyjną. Dobra rozpuszczalność tych związków, połączona z trwałością na powietrzu pozwala na ich potencjalne zastosowanie jako czynników terapeutycznych pozwalających na kontrolowane uwalnianie bioaktywnych form srebra(I). Kluczowe doniesienie opisujące te kompleksy (P. Smoleński i in., Dalton Trans. 2013, 10.1039/c3dt33026e) było cytowane już 27 razy.</p> <p>Szczególnym osiągnięciem ostatniego okresu w badaniach nad oddziaływaniami jonów z peptydami i białkami było opisanie wiązania jonów metali do fragmentów białek Hpn i HypA regulujących chemię niklu(II) w komórkach H. pylori (M. Rowińska-Żyrek i in. Metallomics 2013, 15 cytowań, 10.1039/c3mt20166j, Dalton Trans. 2013, 11 cytowań, 10.1039/c2dt32195e). Uzyskane wyniki mogą przyczynić się do opracowania skutecznych metod terapeutycznych w zakażeniach H. pylori.</p>	
9	Synteza nowych heterocyklicznych nanografenów	<p>Nanografeny, molekularne odpowiedniki grafenu o skończonych wymiarach, mogą odegrać kluczową rolę w dalszym rozwoju elektroniki molekularnej ze względu na jednorodność strukturalną i obecność przerwy energetycznej. Projektowanie i synteza nowych nanografenów oraz ich analogów jest gwałtownie rozwijającym się obszarem chemii organicznej. Metoda fold-in, opracowana w Zespole Syntezy Organicznej, stanowi nowatorskie podejście do syntezy struktur o rozległej koniugacji pi-elektronowej (Angew. Chem. 2013, IF 11.34, 19 cytowań, 10.1002/anie.201208547). Unikalność metody fold-in wynika z wykorzystania makrocyclicznych prekursorów i zdolności efektywnego wprowadzania naprężeń wewnętrznych. Oprócz układów czasowych, pozwala ona również na konstruowanie struktur o ujemnej krzywiznie gaussowskiej, takich jak oktulen (Angew. Chem. 2016, 10.1002/anie.201608384), pierwszy pierścień węglowodorowy wykazujący zdolność wiązania anionów w roztworze. Eksploracja potencjału syntetycznego metody fold-in jest częścią rozległego programu badawczego, oryginalnego w skali krajowej, zainicjowanego w 2011 r. przez dr hab. M. Stępnia. Program ten zaowocował dotąd kilkoma znaczącymi osiągnięciami w zakresie chemii skondensowanych układów heteroaromatycznych, takimi jak synteza nowej klasy nanokołpaków (JACS 2015, IF 13.04, 14 cytowań, 10.1021/ja511951x), rozwinięcie chemii struktur typu HPHAC (JACS 2014, 10.1021/ja508963v; Chem. Sci. 2015, 10.1039/C5SC03280F; Angew. Chem. 2016, 10.1002/anie.201608400), oraz</p>	Obszar nauk ścisłych

Lp.	Nazwa osiągnięcia	Opis osiągnięcia	Obszar wiedzy właściwy dla osiągnięcia
		hybrydowych oligopiroli o strukturze donorowo-akceptorowej (JACS 2016, 10.1021/jacs.6b07826). Badania Zespołu prowadzone są w oparciu o finansowanie Narodowego Centrum Nauki (7 projektów, w tym SONATA BIS, OPUS i PRELUDIUM).	
10	Współtworzenie i koordynacja projektu LUMINET	<p>Projekt European Network on Luminescent Materials - LUMINET realizowany był w okresie od 01.12.2012 do 30.11.2016 w ramach ogólnoeuropejskiego konsorcjum obejmującego 12 jednostek akademickich i przemysłowych z 10 krajów Europy: OSRAM AG, Philips Electronics Nederland B.V., Universidade de Aveiro (Portugalia, prof. Luis Carlos), Universität Bern (Szwajcaria, prof. Karl W. Krämer), Centre de Biophysique Moléculaire CNRS (Francja, prof. Stéphane Petoud), Instytut Fizyki CAS (Czechy, prof. Martin Nikl), Instytut Fizyki, Uniwersytet Tartu (Estonia, dr Michail. G. Brik, prof. Marco Kirm), Universiteit Utrecht (Holandia, prof. Andries Meijerink), Instituto de Ciencia Molecular, Universitat de Valencia, (Hiszpania; prof. Henk Bolink), Università Degli Studi de Verona (Włochy; prof. Marco Bettinelli), Ruhr-Universität Bochum (Niemcy, prof. Anja Verena Mudring) oraz Wydział Chemii UWr (prof. dr hab. Eugeniusz Zych). Konsorcjum powstało w ramach mechanizmu Marie Curie Actions Initial Training Networks. Jego celem był rozwój europejskich badań w obszarze materiałów luminescencyjnych oraz utworzenie programu kształcenia specjalistów w tym obszarze chemii materiałowej. W projekcie uczestniczyło 11 doktorantów i 4 post-doców. Całkowity budżet projektu wynosił 1 862 339,07 euro, z czego dla UWr przypadło w okresie rozliczeniowym 1 112 536,17 zł. Projekt zaowocował dotąd ok. 80 publikacjami (w tym 5 z UWr), 7 patentami i 4 rozprawami doktorskimi.</p> <p>Strona polska występowała początkowo w roli konsorcjanta, a od 1.11.2014 - w roli koordynatora projektu. Efektywność zarządzania projektem przez Wydział Chemii została pozytywnie oceniona przez konsorcjantów, co wskazuje na dobre przygotowanie jednostki do koordynowania dużych działań finansowanych przez EU.</p>	Obszar nauk ścisłych