

Synteza, charakterystyka oraz zastosowanie dynamicznych sieci metalo-organicznych opartych na mieszanych łącznikach

Dr Kornel Roztocki



Autoreferat

Poznań, 2025

Spis treści

1. Dane osobowe	3
2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe.....	3
3. Wykształcenie	3
4. Dotychczasowe zatrudnienie w jednostkach naukowych	4
5. Wskazanie osiągnięcia naukowego wynikającego z art. 16 ust. 2 Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki	4
Tytuł osiągnięcia naukowego	4
Artykuły ujęte w cyklu publikacji przedstawionych w rozprawie	4
Wprowadzenie	9
Cel naukowy oraz możliwe wykorzystanie badań	13
Omówienie osiągnięć.....	14
Wkład w rozwój dziedziny	26
Dalsze perspektywy rozwoju	27
6. Istotna aktywność naukowa realizowana w więcej niż jednej uczelni i instytucji naukowej w szczególności zagranicznej.	29
7. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę	30
8. Dodatkowe osiągnięcia naukowe i szkolenia	32
Dane scjentometryczne całkowitego dorobku	32
Artykuły ujęte w doktoracie	32
Pozostałe artykuły naukowe	33
Patenty	35
Zgłoszenia patentowe	35
Nagrody i wyróżnienia	35
Kierowanie projektami badawczymi	35
Projekty aparaturowe	36
Staże zagraniczne.....	36
Współpraca z przemysłem	36
Opiekun pomocniczy	37
Opieka nad studentami studiów licencjackich i magisterskich	37
Rozdziały w książkach	37
Działalność organizacyjna	37
Spotkania z inkubatorami, przemysłem i Urzędem Patentowym	38
Wybrane wykłady i prezentacje	38
Wybrane prezentacje posterowe	39
Projekty badawcze, główny wykonawca	39
Recenzje artykułów naukowych oraz projektów badawczych.....	39
Rozwój kompetencji miękkich	40
Dydaktyka.....	40
Skrypty dla studentów	40
Literatura.....	41

1. Dane osobowe

Imię i nazwisko:	Kornel Roztocki
Miejsce zatrudnienia:	Wydział Chemii UAM ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Zakład Krystalografii
E-mail:	kornel.roztocki@amu.edu.pl
ORCID:	0000-0001-7102-9802

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

a. Stopień doktora nauk chemicznych, 2019 r.

Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie

Tytuł pracy: „*Synteza sieci metalo-organicznych Zn-MOF i Cd-MOF o mieszanych łącznikach z grupy acylohydrazonów i dikarboksylanów*”

Promotor: Prof. dr hab. Dariusz Matoga

b. Dyplom magistra chemii, 2014r.

Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie

3. Wykształcenie

2014-2019	Studia doktoranckie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie, <i>summa cum laude</i>
2012-2014	Studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie, <i>wyróżnienie</i>
2009-2012	Studia licencjacki na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie
2006-2009	Liceum Ogólnokształcące im Marii Konopnickiej w Jedliczu

4. Dotychczasowe zatrudnienie w jednostkach naukowych

od 2023.11	Adiunkt naukowo-dydaktyczny, Wydział Chemii, Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu
2022.05-2023.10	Adiunkt badawczy, Wydział Chemii, Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu
2020.11-2022.04	Adiunkt badawczy, Centrum Zawansowanych Technologii, Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu
11.2019-10.2020	Samodzielny chemik (stanowisko naukowo-techniczne), Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie

5. Wskazanie osiągnięcia naukowego wynikającego z art. 16 ust. 2 Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki¹

Tytuł osiągnięcia naukowego

Synteza, charakterystyka oraz zastosowanie dynamicznych sieci metalo-organicznych opartych na mieszanych łącznikach

Artykuły ujęte w cyklu publikacji przedstawionych w rozprawie habilitacyjnej^{2,3}

Ocena mojego indywidualnego wkładu w powstanie poszczególnych publikacji nie jest łatwa, ponieważ zdecydowana większość zrealizowanych badań nie byłaby możliwa bez zaangażowania wielu znakomitych współpracowników – zarówno z Polski, jak i z zagranicy. W tym miejscu pragnę złożyć im wyrazy wdzięczności.

Niemniej jednak, we wszystkich projektach, z wyjątkiem pracy dotyczącej bramki logicznej oraz sieci CALF-20, byłem autorem koncepcji badawczej oraz samodzielnie sformułowałem

¹Dz.U. nr 65, poz. 595, z późniejszymi zmianami.

² IF został podany na podstawie danych z Journal Citation Reports.

³ Prezentowane artykuły są rezultatem badań naukowych kierowanych przeze mnie projektów badawczych NCN, Sonatina oraz OPUS.

intelektualne podstawy danego kierunku badań. Stanowiły one punkt wyjścia, na którym stopniowo nadbudowywana była ekspertyza wniesiona przez wybitnych współautorów.

H.1 Roztocki K*, M. Rauche, V. Bon, S. Kaskel, E. Brunner, D. Matoga*, Combining In Situ Techniques (XRD, IR, and ^{13}C NMR) and Gas Adsorption Measurements Reveals CO_2 -Induced Structural Transitions and High CO_2/CH_4 Selectivity for a Flexible Metal–Organic Framework JUK-8 *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2021, 13, 24, 28503–28513 IF₂₀₂₁ = 10,383

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.1:

- sformułowałem hipotezy,
- zaplanowałem eksperymenty,
- wykonałem część eksperymentów (pomiar adsorpcja, syntezy, testy stabilności, pomiar widm w podczerwieni, pomiar PXRD),
- przeanalizowałem wyniki eksperymentów z wyjątkiem części dotyczącej *in situ* NMR,
- przygotowałem manuskrypt,
- odpowiadałem za przygotowanie odpowiedzi do uwag recenzentów.

H.2 K. Roztocki, V. Bon, I. Senkovska, D. Matoga, S. Kaskel* “A Logic Gate Based on a Flexible Metal–Organic Framework (JUK-8) for the Concomitant Detection of Hydrogen and Oxygen”, *Chem. Eur. J.* 2022, e202202255 IF₂₀₂₀ = 4,300

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.4:

- uczestniczyłem w stworzeniu koncepcji i zaplanowaniu eksperymentów,
- wykonałem wszystkie eksperymenty,
- przeanalizowałem wyniki eksperymentów,
- przygotowałem pierwszy draft publikacji,
- przygotowałem odpowiedzi do uwag recenzentów.

H.3 K. Roztocki*, F. Formalik, V. Bon, A. Krawczuk, P. Goszczycki, B. Kuchta, S. Kaskel, and D. Matoga* “Tuning Adsorption-Induced Responsiveness of a Flexible Metal–Organic Framework JUK-8 by Linker Halogenation”, *Chem. Mater.* 2022, 34, 7, 3430–3439, IF₂₀₂₂ = 8,600

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.2:

- sformułowałem hipotezy,
- zaprojektowałem i przeprowadziłem syntezę sieci MOF,
- zaplanowałem eksperymenty,
- wykonałem część eksperymentów (pomiar adsorpcji, syntezy materiałów MOF, pomiar PXRD),
- przeanalizowałem wyniki eksperymentów,
- przygotowałem manuskrypt,
- przygotowałem odpowiedzi do uwag recenzentów.

H.4 K. Roztocki*, M. K. Dudek, M. Szufła, F. Formalik, V. Bon, A. Krawczuk, P. Paluch, S. Kaskel, D. Matoga*, Theoretical and Experimental Insights into the Spatial Distribution of Functional Groups in a Multivariate Flexible Metal–Organic Framework, *Chem. Mater.* 2024, 36, 18, 8578–8587 IF₂₀₂₃ = 7,200

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.3:

- sformułowałem hipotezy,
- zaprojektowałem syntezę sieci MOF i MTV-MOF,
- podczas konsultacji z współautorami zaplanowałem eksperymenty,
- wykonałem część eksperymentów (synteza oraz charakterystyka sieci MOF, pomiar adsorpcji, pomiar widm IR oraz pomiar rentgenostrukturalne na próbkach proszkowych),
- przeanalizowałem wyniki eksperymentów,
- przygotowałem manuskrypt poza częścią związaną z badaniami NMR w ciele stałym,
- odpowiadałem za kontakt z redakcją czasopisma i przygotowywałem odpowiedzi do uwag recenzentów.

H.5 SK Sobczak, J Drwęska, W Gromelska, K Roztocki*, AM Janiak*, *Small* 20 (51), 2402486 „Multivariate Flexible Metal–Organic Frameworks and Covalent Organic Frameworks” IF₂₀₂₃ = 13,00; **artykuł na zaproszenie**

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie prac H.5

- otrzymałem zaproszenie od redakcji,
- stworzyłem koncepcję przeglądu,

- przygotowałem abstrakt, wprowadzenie, perspektywy i wnioski,
- wraz z prof. UAM A. Janiak przygotowałem ostateczną wersję pracy,
- odpowiadałem za kontakt z redakcją czasopisma i przygotowywałem odpowiedzi do uwag recenzentów.

H.6 K. Roztocki*, S. Sobczak, A. Smaruj, A. Walczak, M. Gołdyn, V. Bon, S. Kaskel, and A. R. Stefankiewicz* “Tuning the guest-induced spatiotemporal response of isostructural dynamic frameworks towards efficient gas separation and storage” *J. Mater. Chem. A*, 11 (35), 18646-18650, IF₂₀₂₃ = 10,800

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.6:

- sformułowałem hipotezę badawczą,
- zaprojektowałem syntezę sieci MOF,
- zaplanowałem wszystkie eksperymenty,
- przeanalizowałem wyniki eksperymentów,
- przygotowałem manuskrypt,
- odpowiadałem za kontakt z redakcją czasopisma i przygotowywałem odpowiedzi do uwag recenzentów.

H.7 S.K. Sobczak, B. Mazur, M. Malińska, F. Formalik, V. Bon, A. Khadiev, S. Kaskel, B. Kuchta, A.M. Janiak, K. Roztocki* “How a single atom influences the spatiotemporal response of flexible MOFs: insights from theory and experiment” *JACS*, **2025**, 147, 25, 21575–21585, IF₂₀₂₃ =14.50

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.7:

- sformułowałem hipotezy,
- wraz z współautorami zaplanowałem eksperymenty,
- przeanalizowałem wyniki eksperymentów,
- przygotowałem ostateczną wersję manuskryptu,
- odpowiadałem za kontakt z redakcją czasopisma i przygotowywałem odpowiedzi do uwag recenzentów.

- H.8 K. Roztocki*, W. Gromelska, F. Formalik, A. Giordana, L. Andreo, G. Mahmoudi*, V. Bon, S. Kaskel, L. J. Barbour, A. Janiak, and E. Priola, “Shape-Memory Effect Triggered by π - π Interactions in a Flexible Terpyridine Metal–Organic Framework”. *ACS Mater. Lett.* 2023, 5, 4, 1256–1260 IF₂₀₂₃ = 9,900

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.8:

- nawiązałem współpracę badawczą,
- wraz z Profesorem Ghodrat Mahmoudi sformułowałem hipotezy badawcze,
- wraz z współautorami zaplanowałem eksperymenty,
- przeanalizowałem wszystkie dane,
- przygotowałem draft,
- przygotowałem ostateczną wersję manuskryptu,
- odpowiadałem za kontakt z redakcją oraz odpowiedzi do uwag recenzentów.

- H.9 J Drwęska, F Formalik, K Roztocki*, RQ Snurr, LJ Barbour, AM Janiak*, Unveiling Temperature-Induced Structural Phase Transformations and CO₂ Binding Sites in CALF-20, *Inor. Chem.* 63 (41), 19277-19286 IF₂₀₂₃ = 4.300

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.9:

- wraz z Profesor UAM Agnieszką Janiak przygotowałem koncepcję oraz zaplanowałem eksperymenty,
- przygotowałem wstęp literaturowy,
- nawiązałem współpracę z grupą z Northwestern University,
- wraz z prof. A. Janiak nadzorowałem przygotowanie manuskryptu,
- wraz z Profesor UAM Agnieszką Janiak recenzowałem wersję ostateczną
- wraz z Profesor UAM Agnieszką Janiak odpowiadałem za kontakt z redakcją oraz odpowiedzi do uwag recenzentów.

- H.10 J. Drwęska, K. Roztocki*, A.M. Janiak* Advances in chemistry of CALF-20, a metal–organic framework for industrial gas applications *Chem. Commun.* 61 (6), 1032-1047 IF₂₀₂₃ = 4.300, **artykuł na zaproszenie**

Precyzyjne określenie wkładu jaki wniosłem w powstanie pracy H.10:

- uzyskałem zaproszenie od redakcji,

- wspólnie z pozostałymi autorami opracowałem koncepcję przeglądu,
- wraz z prof. Profesor UAM Agnieszką Janiak przygotowałem streszczenie, wprowadzenie, perspektywy oraz wnioski końcowe,
- wraz z Profesor UAM Agnieszką Janiak przygotowanie manuskryptu,
- wraz z Profesor UAM Agnieszką Janiak recenzowałem wersję finalną manuskryptu,
- wraz z Profesor UAM Agnieszką Janiak odpowiadałem za kontakt z redakcją oraz odpowiedzi do uwag recenzentów.

Dane scjentometryczne publikacji przedstawionych w rozprawie habilitacyjnej⁴

Sumaryczny impact factor publikacji z roku publikacji: 87,28

Liczba cytowań publikacji wydanych w latach 2021-2025:

103 (łącznie liczba)

88 (bez autocytowań)

Wprowadzenie

Zmiany klimatu to naukowo uznane zjawisko powodujące poważne zagrożenie dla ekosystemów, gospodarek i społeczeństw na całym świecie. ^[1–3] Jego początki sięgają czasów rewolucji przemysłowej, która zbiegła się z rozpoczęciem epoki antropocenu^[4] — okresu, w którym powszechne wykorzystanie paliw kopalnych, takich jak węgiel, ropa naftowa i gaz ziemny, zaczęło dominować w produkcji i konsumpcji energii. To właśnie wtedy rozpoczął się gwałtowny wzrost stężenia gazów cieplarnianych, a szczególnie dwutlenku węgla. NASA podało, że w maju 2025 roku stężenie CO₂ osiągnęło bezprecedensowy poziom 431 ppm. W 2023 roku spalanie paliw kopalnych na potrzeby energetyki, transportu i produkcji prądu doprowadziło do emisji rekordowej ilości 37,4 miliarda ton CO₂ do atmosfery, podczas gdy intensywne wylesianie na potrzeby rolnictwa i rozwoju ośrodków ludzkich zmniejszyło zdolność planety do pochłaniania dwutlenku węgla, pogłębiając ten problem.

W rezultacie, średnia roczna wartość temperatury dla roku 2024 wyniosła $1,62 \pm 0,06$ °C powyżej średniej z okresu 1850–1900, który tradycyjnie stanowi punkt odniesienia dla epoki przedindustrialnej. Skutki zmian klimatycznych obejmują coraz częstsze i bardziej ekstremalne

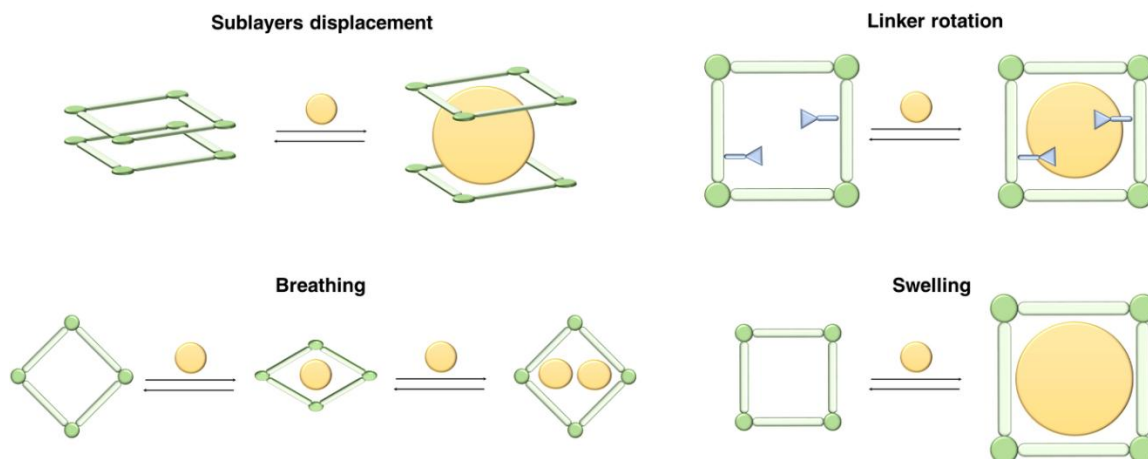
⁴ Liczba cytowań z bazy Scopus, 17.09.2025

zjawiska pogodowe, takie jak huragany, susze i powódzie, a także podnoszenie się poziomu mórz.^[5]

Jednym z najbardziej energochłonnych procesów przemysłowych, odpowiedzialnym za emisję 10–15% globalnego CO₂, jest separacja podobnych cząsteczek.^[6] Tradycyjnie w procesach separacji stosowana jest destylacja, jednak ze względu na ogromne zużycie energii nie można jej uznać za przyjazną dla środowiska. Aby ograniczyć koszty oraz negatywny wpływ procesów separacyjnych na środowisko, społeczność naukowa i przemysł podejmują intensywne działania na rzecz opracowania alternatywnych rozwiązań. Jednym z obiecujących kierunków rozwoju są stałe adsorbenty, które umożliwiają selektywną separację gazów na podstawie oddziaływań fizykochemicznych oraz precyzyjnie zdefiniowanej struktury porów.^[7]

Sieci metalo-organiczne to typowo krystaliczne materiały które można zaliczyć do dwóch grup ciał stałych. Jednocześnie MOFy są polimerami koordynacyjnymi gdzie organiczne przynajmniej dwu funkcyjne łączniki, np. dikarboksylany, pochodne pirydyny, imidazole tworzą mostkowe połączenie z węzłami będącymi jonami metali lub klastrami metalicznymi; oraz materiałami porowatymi posiadają potencjalnie wolne przestrzenie.^[8] W tak skonstruowanym ciele stałym cząsteczki rozpuszczalnika, typowo dimetyloformamidu (DMF), są związane z szkieletem za pomocą słabych oddziaływań międzycząsteczkowych. Możliwość desolvatacji, procesu usunięcia cząsteczek „gościa” z poru, z zachowaniem dalekozasięgowego uporządkowania prowadzi do uzyskania szkieletu posiadającego wolne nanometrycznie zdefiniowane przestrzenie. Właśnie ta cecha pozwala zaliczyć sieci metalo-organiczne do ciał porowatych^[9] i otwiera drogę do ich potencjalnego zastosowania w technologiach związanych z gazami.^[10]

Wśród sieci metalo-organicznych istnieje podgrupa która po usunięciu rozpuszczalnika nie traci dalekozasięgowego uporządkowania^[11–13], ale w sposób znaczny zmienia swoją strukturę poprzez wzajemne przemieszczenie atomów w przestrzeni (**Rysunek 1**). Zmiana ta może być związana ze zgięciem łącznika, zmianą kątów pomiędzy wiązaniami, separacją warstw, rotacją grupy funkcyjnej czy nawet zerwaniem wiązania koordynacyjnego. W wyniku tego sieci metalo-organiczne wykazują zjawiska fizyczne, których nie występują dla sztywnych materiałów porowatych^[14]. Dodatkowo, przez ekspertów sieci MOF są uważane za jedne z materiałów, które mogą zmienić chemię planety.^[15]

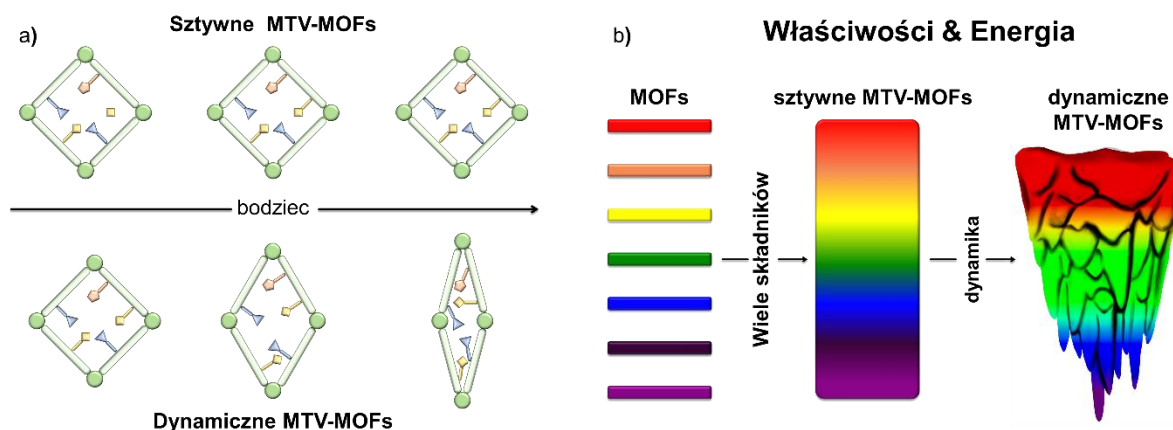


Rysunek 1 Dominujące typy zmian strukturalnych pod wpływem zewnętrznego bodźca obserwowane dla sieci elastycznych szkieletów metalo-organicznych; w tym przypadku adsorpcji cząsteczki gościa. Zaadaptowano za zgodą Willey.^[11]

Zaobserwowane zmiany strukturalne mogą być kolosalne – na przykład objętość komórki elementarnej DUT-8 zwiększyła się o ponad 200% podczas przejścia z gęstej, nieporowatej fazy do otwartej fazy podczas przyjmowania cząsteczek gości. W ostatnich latach elastyczne MOFy przyciągnęły znaczną uwagę ze względu na ich zdolność do adaptacji, przypominającą struktury biologiczne^[16]. Ciekawym przypadkiem jest materiał DUT-49, który w wyniku zachodzących zmian strukturalnych wykazuje zdolność do wyrzucania ze swojej struktury gazów w wyniku czego dochodzi do desorpcji pomimo wzrostu ciśnienia.^[17] Inny elastyczny MOF na bazie porfiryny i cynku przypomina molekularne origami, mechaniczny metamateriał.^[18] Jednak najbardziej znaczącymi przykładami przenikania się MOF-ów z metaloproteinami są elastyczne bioMOF-y oparte na di- lub tripeptydach, które zostały zsyntezowane i zbadane przez grupę Rosseinsky'ego.^[19–21]

Przemiany wywołane przez gazy lub pary stwarzają możliwość przewyższenia sztywnych odpowiedników w zastosowaniach związanych z magazynowaniem czy rozdziałem podobnych cząsteczek. Ten potencjał potwierdza zdolność do rozdzielania izotopologów wody^[22], oczyszczania etylenu^[23], separacji izotopów wodoru^[24,25] czy magazynowania metanu^[26,27].

Zwiększenie stopnia skomplikowania sieci MOF a tym samym modulacja ich fizykochemii do zaawansowanych zastosowań może nastąpić poprzez połączenie dynamicznego charakteru badanych układów wraz z zawieszaniem wielu funkcjonalnych grup na jego szkielecie (**Rysunek 2**). Powoduje to transformację pojedynczych stanów energetycznych jakie są reprezentowane przez sztywne sieci metalo-organiczne w trójwymiarowe kontinuum energii.



Rysunek 2 a) Przedstawienie sztywnych multikomponentowych MTV-MOF oraz elastycznych multikomponentowych MTV-MOF, a także b) porównanie energii i nieokreślonych właściwości multikomponentowych sztywnych lub elastycznych sieci MOF z ich jedno-składnikowymi odpowiednikami. Rysunki zostały zaadaptowane za zgodą czasopisma.^[11]

Właściwości materiałów multikomponentowych zależą nie tylko od ich składu. Często wykazują one właściwości, które nie są prostą liniową kombinacją jednoskładnikowych odpowiedników^[28], co wskazuje, że przyczyną tego zjawiska jest rozmieszczenie grup funkcyjnych w przestrzeni. Szkielet strukturalny stanowi niezmiennie rusztowanie, natomiast możliwe jest różne lokalne rozmieszczenie grup na nim, tworząc w ten sposób sekwencję. Yaghi nazwał to zjawisko „niejednorodnością w ramach uporządkowania” („heterogeneity within order”)^[29,30].

Niejednorodności mogą być wygenerowane poprzez różnice w prętach metalicznych^[31] tworzących podstawę porowatej struktury MOF-74. Mapowanie ujawniło cztery różne typy rozmieszczenia metalu, zależne od rodzaju metalu użytego do syntezy i temperatury reakcji. Przedstawione lokalne niejednorodności mogą prowadzić do interesujących właściwości, takich jak regulowana sorpcja i separacja gazów^[32] czy lub jednocześnie usuwanie zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych z wody.^[33] Badanie ich rozmieszczenia jest zatem kluczowe dla odkrywania zależności między dystrybucją przestrzenną a właściwościami.

Sposób, w jaki różne grupy funkcyjne są rozmieszczone w materiale, skutkuje zróżnicowaniem lokalnym, określanym jako skład przestrzenny (ang. spatial composition). Na podstawie tej definicji opracowano nową metodę klasyfikacji materiałów zależnych od sekwencji. Związki te można podzielić na dwie grupy: periodyczne pod względem składu, jeśli grupy funkcyjne / metale tworzą powtarzający się wzór, lub nieperiodyczne, jeśli kolejność grup funkcyjnych jest losowa. Taka klasyfikacja pozwala również na ocenę poziomu precyzji w projektowaniu materiałów zależnych od sekwencji. Yaghi zwraca uwagę na fakt, że szkielet, zawsze periodyczny, ma ogromny wpływ na ogólny charakter materiału. Powinien on być

względnie odporny na zakłócenia i mieć określoną geometrię. Sieci MOF spełniają te kryteria, co czyni je idealnymi kandydatami do tworzenia materiałów zależnych od sekwencji o pożądanych właściwościach.

Zawartość różnych składników (metali, łączników) można łatwo zidentyfikować za pomocą roztworzenia i przeanalizowania próbki. Jednak konwencjonalne techniki, takie jak dyfrakcja rentgenowska, spektroskopia NMR, mikroskopia elektronowa czy fluorescencyjna, nie są wystarczające do mapowania atomów w przestrzeni. Dlatego też metody badania samego rozmieszczenia przestrzennego są nadal rozwijane.^[11]

Pierwsza udana próba scharakteryzowania niejednorodności w MTV-MOF-ie zawierającym wiele linkerów została opisana w 2013 roku.^[34] Do tego celu wykorzystano NMR w cieple stałym połączeniu z symulacjami molekularnymi, co pozwoliło na wygenerowanie trójwymiarowych map dystrybucji łączników w przestrzeni. Analiza tych map sugeruje, że przestrzenne rozmieszczenie funkcjonalności może przyjmować jedną z trzech postaci: losową, naprzemienną lub grupową. Różne scenariusze rozmieszczenia wynikają z różnic w interakcjach pomiędzy grupami funkcyjnymi. Te, które ze sobą chętnie oddziałują, tworzą skupiska, natomiast mniej kompatybilne grupy funkcyjne prowadzą do rozkładu losowego.

Warto zauważyć, że pomimo rosnącego zainteresowania multikomponentowymi MOF-ami, nie istnieje jeszcze ogólna, ustalona metoda określania przestrzennego rozkładu ich składników.^[31,35–37] Techniki wykorzystywane w tym celu wymagają dalszego udoskonalenia i nie zawsze są łatwo dostępne, co skutkuje stosunkowo niewielką liczbą badań struktury lokalnej.

Cel naukowy oraz możliwe wykorzystanie badań

Centralnym punktem moich badań są dynamiczne sieci metalo-organiczne. W tym obszarze mogę wyróżnić trzy główne działy:

- I. synteza i charakterystyka nowych sieci MOF (**H.3, H.4, H.6, H.8**),
- II. teoretyczne oraz eksperymentalne wgląd w mechanizm odpowiedzialny za obserwowane właściwości fizykochemiczne (**H.1, H.3, H4-H.10**),
- III. potencjalne zastosowanie sieci metalo-organicznych w separacji gazów oraz konstrukcji sensorów (**H.1, H.2 i H.6**).

Wymienione obszary mogą zostać wykorzystane przez innych badaczy do:

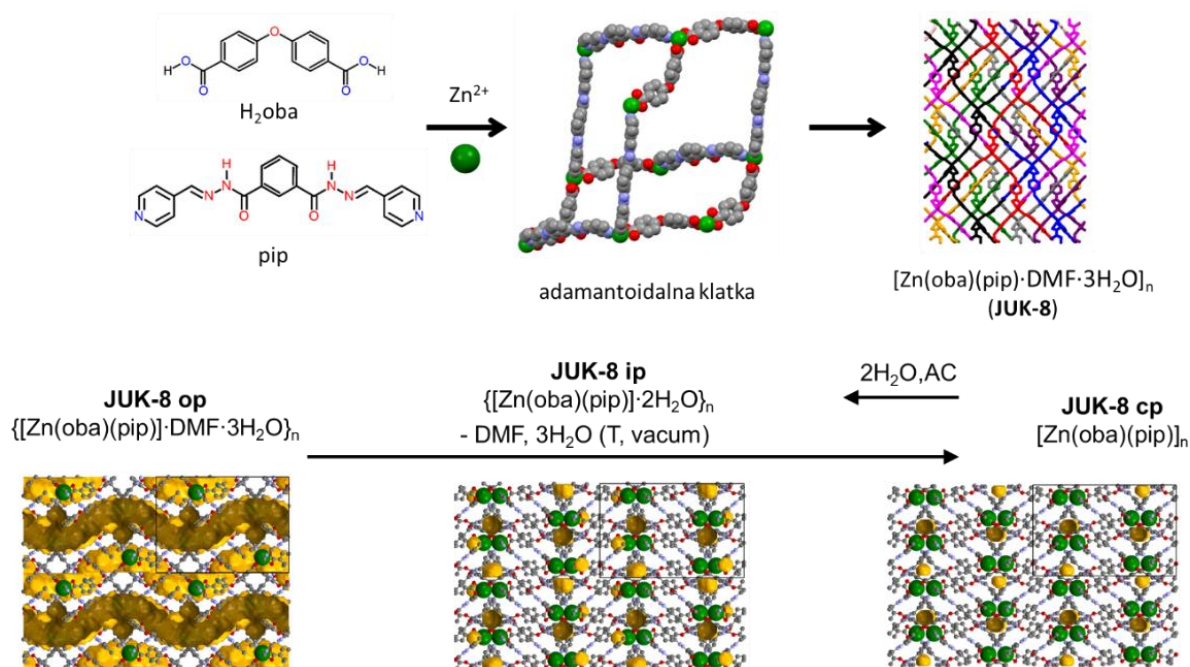
- i. inżynierii i syntezy dynamicznych sieci metaloorganicznych o określonych właściwościach fizykochemicznych,

- ii. opracowania bardziej efektywnych metod separacji cząsteczek,
- iii. wyznaczania przestrzennej dystrybucji atomów w dynamicznych sieciach MOF,
- iv. budowy systemów logicznych opartych na sieciach MOF,
- v. pogłębienia fundamentalnego zrozumienia działania dynamicznych sieci MOF,
- vi. rozwoju technik *in situ*,
- vii. opracowania metod walidacji teoretycznych protokołów badania dynamicznych sieci metalo-organicznych.

Omówienie osiągnięć

Nadmienię, że opis ten skonstruowałem w taki sposób, aby zawierał możliwie najmniej detali zawartych w dziesięciu opublikowanych pracach naukowych (H.1-H.10), a pokazywał jedynie moje najważniejsze osiągnięcia w sposób przystępny dla szerokiego spektrum odbiorców. Dociekliwych odsyłam do artykułów, które pełne są niuansów.

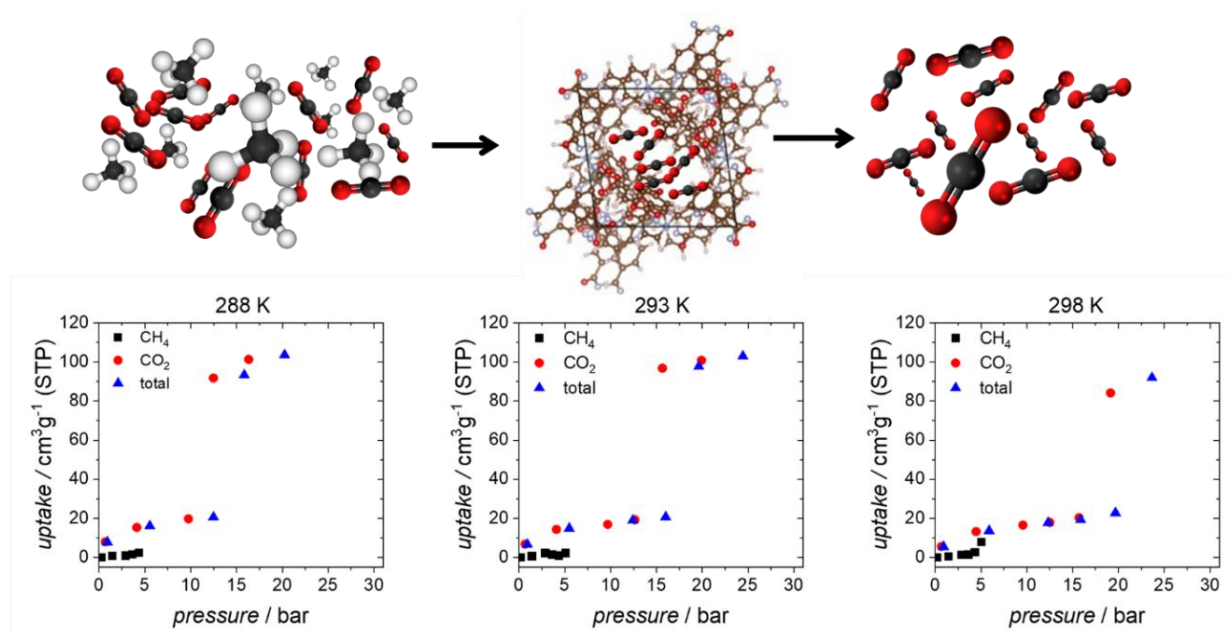
Pierwsza część osiągnięcia (H.1 do H.4) dotyczy sieci metaloorganicznej JUK-8,^[38] którą otrzymałem i opisałem podczas pracy na Uniwersytecie Jagiellońskim (publikacja D.12; **Rysunek 3**). Pomimo ośmiokrotnej interpenetracji materiał ten jest porowaty i ulega przemianie strukturalnej podczas aktywacji do tzw. fazy nieporowatej, a adsorpcja wody lub dwutlenku węgla odwraca ten proces, przekształcając JUK-8 w fazę porowatą.



Rysunek 3 Schemat syntezy oraz wybrane elementy struktury materiału JUK-8 (górny rząd). Strukturalne transformacje spowodowane desolwatacją oraz wychwytem cząsteczek wody z powietrza (dolny rząd). Rysunki zostały zaadaptowane za zgodą czasopisma.^[38,39]

Dzięki kierowanemu przeze mnie projektowi Sonatina, skoncentrowanemu na badaniu właściwości fizykochemicznych tej sieci oraz jej potencjalnych zastosowaniach. Dzięki temu udało się poszerzyć stan wiedzy na temat tego układu.

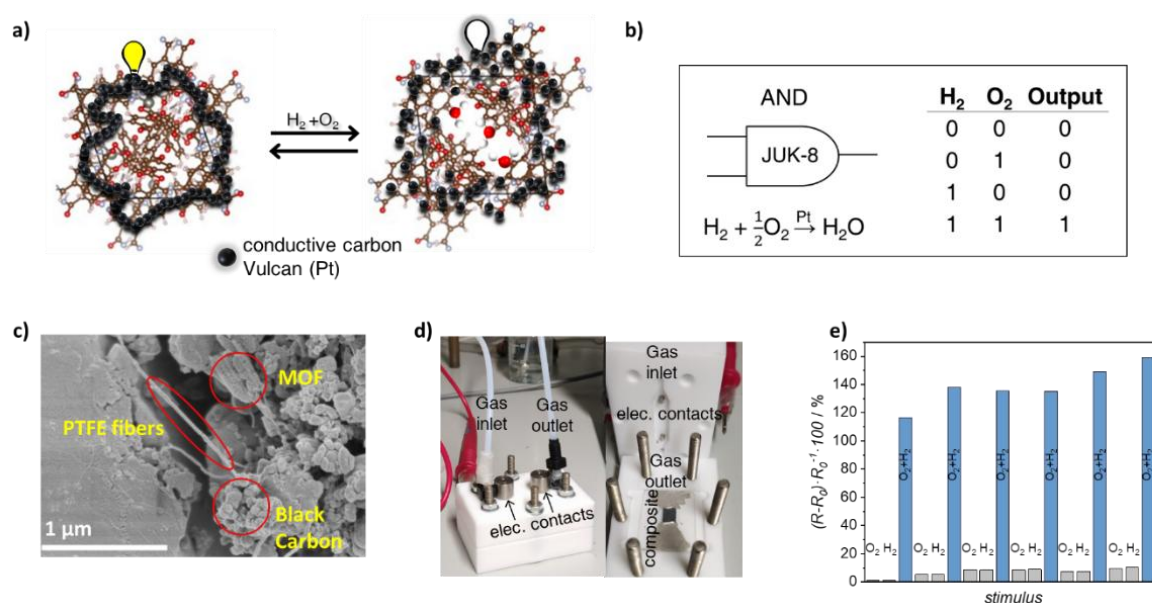
Praca H.1 umożliwiła uzyskanie wglądu w mechanizm otwierania struktury podczas akomodacji cząsteczek dwutlenku węgla, dzięki zastosowaniu trzech technik in situ.^[39] Pozwoliło to na śledzenie globalnych zmian strukturalnych za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej oraz lokalnych oddziaływań za pomocą spektroskopii w podczerwieni i rezonansu magnetycznego $^{13}\text{CO}_2$. Dodatkowo wykazałem wysoką stabilność tego materiału, potwierdzoną poprzez stukrotne odparowywanie wody poprzez gotowanie. Wysoka odporność chemiczna wynika z jej ośmiokrotnego „przeplotu” oraz rozbudowanej sieci wiązań wodorowych pomiędzy atomem wodoru z grupy acylohydrasonowej oraz tlenu z grupy COO^- łącznika dikarboksylianowego. Ponadto udowodniłem możliwość zastosowania materiału JUK-8 jako adsorbentu zdolnego do selektywnej adsorpcji CO_2 z mieszanin CO_2/CH_4 (**Rysunek 4**). Izotermę adsorpcji wykonane dla trzech różnych temperatur wskazują, że w szerokim zakresie temperatur JUK-8 selektywnie adsorbuje około $100 \text{ cm}^3/\text{g}$ CO_2 oraz praktycznie nie adsorbuje metanu z mieszaniny metanu i dwutlenku węgla w stosunku objętościowym 50:50.



Rysunek 4 Schemat transformacji strukturalnej sieci JUK-8 podczas adsorpcji CO_2 mieszaniny metanu i dwutlenku węgla (górny rząd) oraz demonstracja możliwości separacji dwutlenku węgla od metanu (dolny rząd) przy użyciu tej sieci w trzech różnych temperaturach (stosunek objętościowy $\text{CH}_4:\text{CO}_2 = 50:50$). Rysunek został zaadaptowany za zgodą redakcji.^[39]

Publikacja **H.2** opisuje budowę pierwszej bramki logicznej typu „AND” opartej na dynamicznym MOF-ie.^[40] Było to możliwe dzięki wiedzy zdobytej podczas wcześniejszych prac nad siecią JUK-8.^[38,39] Materiał ten charakteryzuje się wysoką stabilnością oraz skokową zmianą objętości podczas adsorpcji wody. Co istotne, nie adsorbuje on wodoru ani tlenu w warunkach pokojowych.

Te właściwości zostały wykorzystane do zaprojektowania bramki logicznej na bazie kompozytu zawierającego przewodzące nanocząstki węgla oraz katalizator platynowy (**Rysunek 5**). W przypadku ekspozycji kompozytu na tlen lub wodór, nie obserwowano produkcji wody ani zmian strukturalnych. Natomiast gdy w układzie obecne były jednocześnie wodór i tlen, dochodziło do ich reakcji katalitycznej na platynie i powstania wody, co indukowało transformację struktury JUK-8 z fazy zamkniętej do otwartej. Skutkiem tego był spadek przewodności nanocząstek węgla rozproszonych w kompozycie a tym samym powstanie sygnału zarejestrowanego za pomocą miernika przewodności. Dodatkowo sprawdziłem, czy jest możliwe ponowne użycie tego kompozytu. Kolejne eksperymenty na tym samym układzie wykazały działanie bramki logicznej w sześciu następujących po sobie cyklach (**Rysunek 5**).

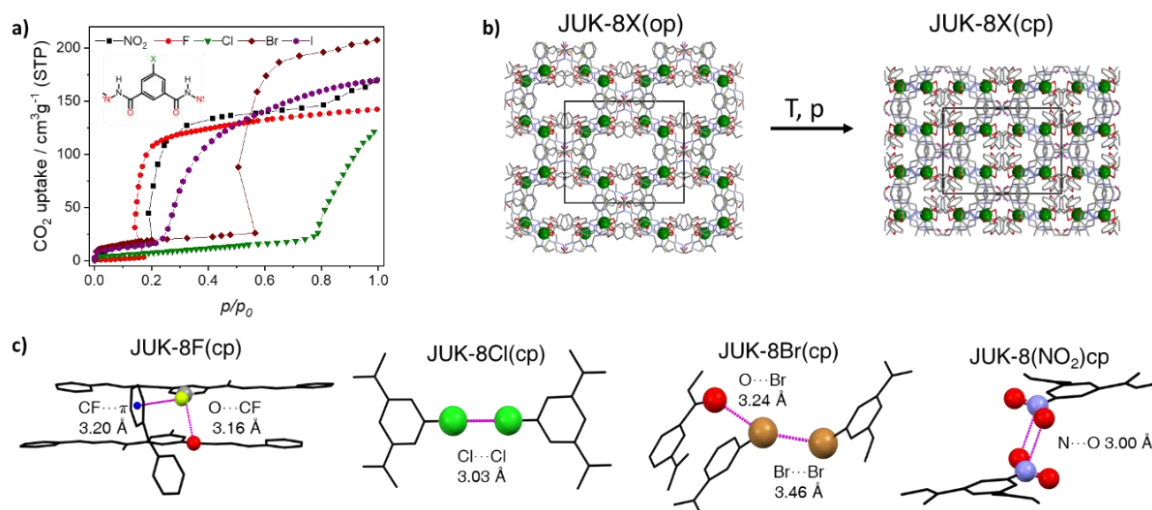


Rysunek 5 Bramka logiczna oparta na kompozycie zawierającym materiał JUK-8: **a, b)** schematyczne przedstawienie zasady działania **c)** kompozytu. **d)** Cela pomiarowa użyta do badania **e)** odpowiedzi kompozytu. Rysunki zaadaptowano za zgodą redakcji z opublikowanych prac.^[38,40]

W pracach **H.3** i **H.4** dokonałem chemicznej modyfikacji tej platformy za pomocą podstawników halogenowych oraz grupy nitrowej wprowadzonych do pierścienia łącznika diacylohydrazonowego.^[37,41] Pozwoliło to na zmianę mechanizmu adsorpcji oraz ilości

zaadsorbowanego dwutlenku węgla (**Rysunek 6**). Procesy te zostały wyjaśnione dzięki badaniom *in situ* PXRD, analizie strukturalnej monokryształów, oraz wglądowi teoretycznemu za pomocą metod DFT.

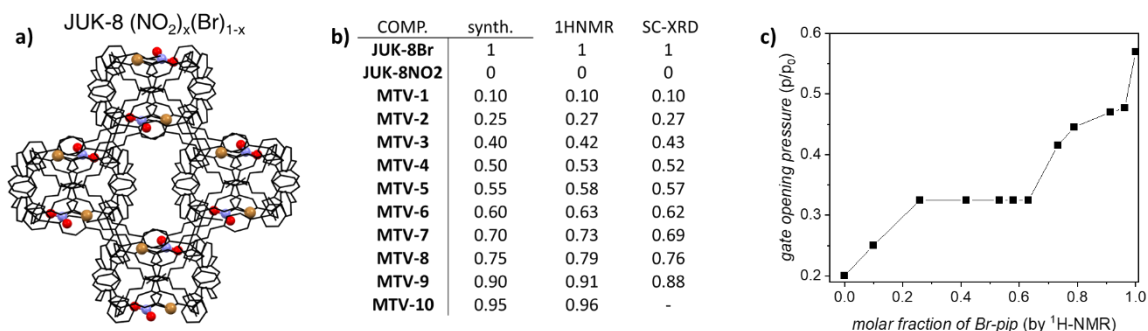
W obu pracach zidentyfikowałem kluczowe oddziaływania wpływające na obserwowane transformacje strukturalne (**Rysunek 5**). Wzrost ilości zaadsorbowanego CO₂, od 30 do 70%, dla materiałów JUK-8X (X = I, Br, NO₂) w stosunku do niepodstawionego materiału JUK-8 wynika z większej możliwej amplitudy zmian strukturalnych. Jest to możliwe dzięki energetycznie korzystnym oddziaływaniom dwutlenku węgla z grupami funkcyjnymi, takimi jak I, Br i NO₂. W przypadku modyfikacji fluorem nie zaobserwowano adsorpcji CO₂ przed globalną zmianą strukturalną, co wynika ze specyficznych oddziaływań atomu węgla przyłączonego do atomu fluoru z tlenem z grupy acylohydrazonowej.



Rysunek 6 Chemiczna manipulacja właściwości sorpcyjnych sieci JUK-8: **a**) izoterma adsorpcji CO₂ w 195 K dla różnych materiałów JUK-8X (X = H, F, Cl, Br, I, NO₂), **b**) schemat przemiany strukturalnej podczas aktywacji, **c**) kluczowe oddziaływania w fazie zamkniętej odpowiadające za zróżnicowane właściwości sorpcyjne. Dla czytelności pominięto desorpcję gazów. Rysunki zaadaptowano za zgodą redakcji z opublikowanych prac.^[37,41]

W publikacji H.4, wykorzystując zdobytą wiedzę na temat tej platformy, przygotowałem serię materiałów typu MTV z zawierających mieszane łączniki NO₂-pip i Br-pip (**Rysunek 7**). Wybór ten był celowy, ponieważ obie platformy charakteryzują się porównywalną maksymalną pojemnością adsorpcyjną względem CO₂ oraz wykazują ten sam mechanizm adsorpcji (**Rysunek 6a**). Istotnie różnią się jednak ciśnieniem, przy którym dochodzi do otwarcia struktury (**Rysunek 6a**). Następnie określiłem zawartość grup funkcyjnych za pomocą dwóch technik: spektroskopii NMR po roztworzeniu materiału oraz dyfrakcji rentgenowskiej na monokryształach. W przypadku materiału MTV-10 nie było możliwe wyznaczenie ułamka molowego z pomiarów SC-XRD ze względu na bardzo niską zawartość

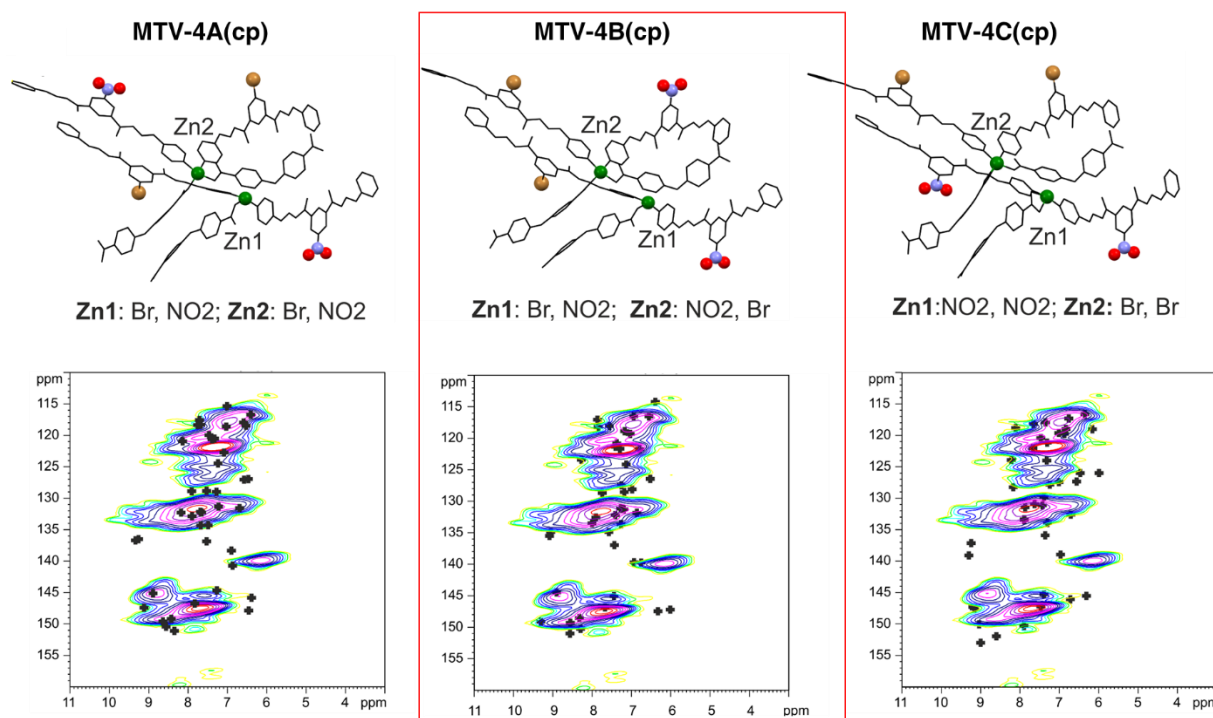
łącznika pip-NO₂ wynoszącą około 5% molowych. Wyniki uzyskane z analizy widma ¹H-NMR roztworzonych materiałów oraz wyznaczone z gęstości elektronowej dla jednego kryształu zgadzają się z wartością użytą do syntezy materiałów MTV-1 do MTV-9. Następnie, zaobserwowałem, że w pewnym zakresie udziału molowego grup bromowych nie występuje zmiana ciśnienia otwarcia struktury, co zostało przedstawione na **Rysunku 7c**.



Rysunek 7 a) Przedstawienie schematyczne struktury materiału MTV JUK-8Br/NO₂ w fazie otwartej, **b)** tabela zawierająca ułamek molowy użyty do syntezy badanych materiałów wraz z ułamkiem molowym wyznaczonym na podstawie badań ¹H-NMR oraz SC-XRD. **c)** Zależność ciśnienia przemiany strukturalnej od ułamka molowego Br-pip. Rysunki zaadaptowano za zgodą redakcji.^[37]

Sugerowało to, że energia otwarcia materiałów MTV w tym przedziale ułamka molowego grup bromowych jest stała, co jest związane z istnieniem określonej przestrzennej dystrybucji atomów w kryształach. Aby uzyskać wgląd, zidentyfikowałem kluczowe oddziaływania w fazie zamkniętej (**Rysunek 6c**), a następnie nawiązałem współpracę badawczą z specjalistami w dziedzinie spektroskopii NMR z Państwowej Akademii Nauk w Łodzi. Pozwoliło to na wykonanie pomiarów widm inv-¹H-¹³C HETCOR zarówno dla czystych związków, jak i dla struktur typu MTV. Dodatkowo zbudowaliśmy teoretyczne modele sieci pozbawionej rozpuszczalnika [Zn(oba)(NO₂-pip)_{0.5}(Br-pip)_{0.5}] (MTV-4(cp)A,B,C), zawierającej różne rozmieszczenie przestrzenne grup NO₂, które posłużyły do obliczeń dwuwymiarowych widm teoretycznych, które w następnym kroku zostały porównane z widmami eksperymentalnymi inv-¹H-¹³C HETCOR aktywowanej sieci MTV-4 (**Rysunek 8**).

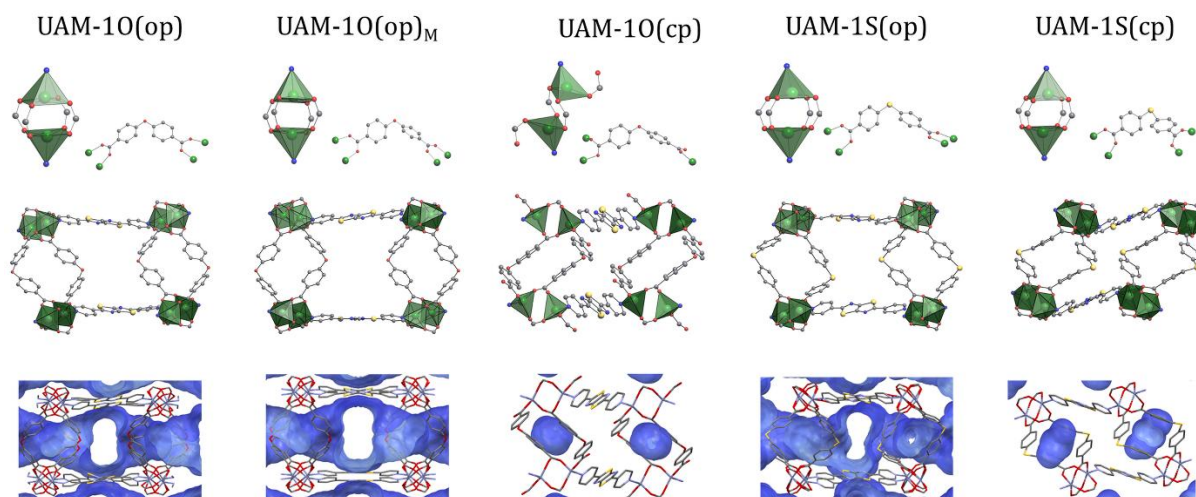
W rezultacie ustalono, że najczęściej występującą domeną w materiale MTV-4 o wzorze [Zn(oba)(NO₂-pip)_{0.5}(Br-pip)_{0.5}] jest struktura MTV-4B (**Rysunek 8**). Zaprezentowany w publikacji **H.4** protokół jest pierwszym podejściem umożliwiającym wyznaczanie rozmieszczenia przestrzennego składników w tak wymagających materiałach, jak multikomponentowe dynamiczne sieci metaloorganiczne. Uważam to za jedno z moich największych osiągnięć, wymagające zaangażowania wielu specjalistów oraz holistycznego podejścia do problemu badawczego.



Rysunek 8 Trzy możliwe przestrzenne rozmieszczenia grup Br i NO₂ w idealnym MTV-4(cP) [Zn(oba)(NO₂-pip)_{0.5}(Br-pip)_{0.5}] odzwierciedlają modele multikomponentowe MTV-4A (po lewej), MTV-4B (w środku) i MTV-4C (po prawej). Dane teoretyczne MTV-4A, B, C (czarne krzyżyki) nałożone na eksperymentalne widmo *inv*-¹H-¹³C HETCOR związku MTV-4. Analiza porównawcza danych eksperymentalnych i teoretycznych wskazując, że najczęściej występującą domeną w kryształ MTV-4 jest domena typu MTV-4B. Rysunki zaadaptowano za zgodą redakcji.^[37]

W publikacji **H.5** przedstawiłem przegląd literaturowy oraz swoje przemyślenia na temat dynamicznych, wieloskładnikowych materiałów typu COF i MOF. Praca ta stanowiła wyraz wcześniejszej intensywnej pracy związanej z publikacją **H.4**. Część jej treści została wykorzystana przy konstruowaniu wstępu teoretycznego, w związku z czym pozwolę sobie jej tutaj nie omawiać szczegółowo – zainteresowanego czytelnika odsyłam do wspomnianego wstępu. Warto jednak podkreślić, że publikacja ta zawiera również liczne propozycje dalszego rozwoju tej klasy materiałów, które obecnie są przeze mnie testowane.

W pracy **H.6.** i **H.7** zaprojektowałem, syntezowałem i scharakteryzowałem dwie izostrukturnalne sieci metaloorganiczne: UAM-1O i UAM-1S (Uniwersytet Adama Mickiewicza materiał numer 1), oparte na kwasach di-karboksylowych oraz N-donorowym łączniku tiazolo-tiazolowym.^{7,24} Różnica jednego atomu w budowie tych materiałów prowadzi do odmiennego mechanizmu desolvatacji (**Rysunek 9**), co zostało szczegółowo wyjaśnione zarówno teoretycznie, jak i eksperymentalnie w publikacji **H.7**.

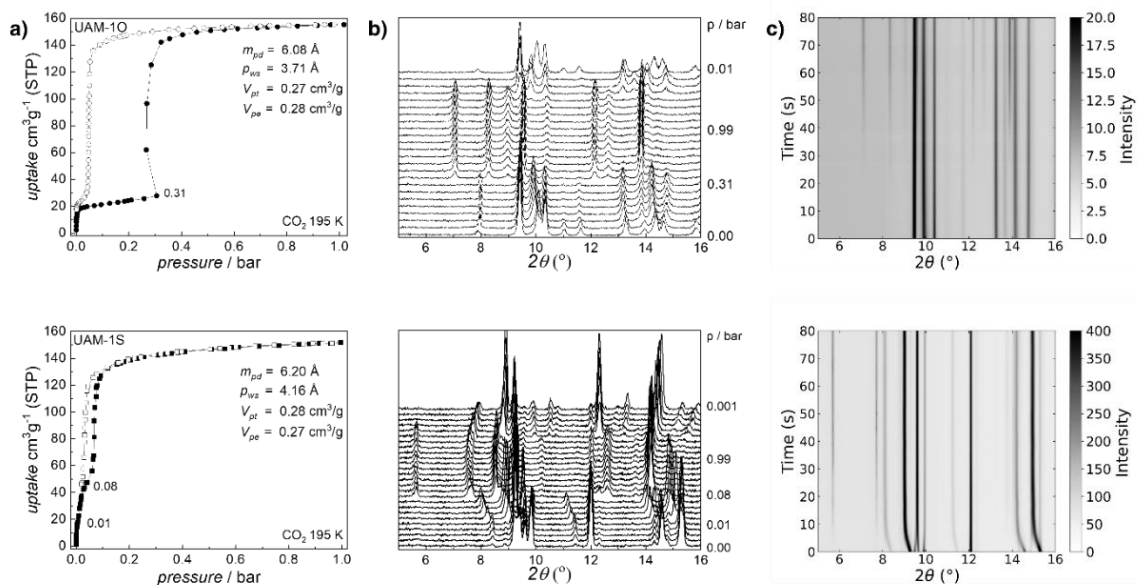


Rysunek 9 Porównanie struktur monokrystalicznych faz o otwartych porach (op) i faz po usunięciu rozpuszczalnika (cp) UAM-1X: klastry metaliczne i konformacja ligandów karboksylowych związanych z kationami cynku (górny rząd), a także reprezentacje trójwymiarowych sieci z zaznaczonymi pustymi przestrzeniami (promień sondy 1.5 Å). Atomy wodoru zostały pominięte dla przejrzystości; oznaczenia atomów: zielony – Zn, szary – C, czerwony – O, niebieski – N, żółty – S. Rysunki zaadaptowano za zgodą redakcji.^[26,42]

W przypadku materiału UAM-1O dochodzi do rozerwania wiązania Zn–O oraz reorganizacji klastra metalicznego. W przypadku UAM-S takie zjawisko nie jest obserwowane. Różnice te wynikają z odmiennej podatności na odkształcenia kątowych łączników. Kwas dikarboksylowy zawierający atom tlenu pomiędzy grupami karboksylowymi jest sztywniejszy, co ogranicza jego zdolności adaptacyjne i wymusza reorganizację klastra metalicznego.

Dodatkowo w przypadku UAM-1O bariera kinetyczna związana z zerwaniem wiązania Zn–O skutkuje powstaniem metastabilnej fazy, UAM-1O(op)_M, która w odpowiedzi na bodziec mechaniczny „eksploduje”, co można zaobserwować na filmie załączonym do pracy **H.7**. Należy nadmienić, że jest to pierwszy przykład eksplodującego materiału MOF. Zjawisko to zostało wytłumaczone na gruncie eksperymentu oraz teorii.

W związku z reorganizacją klastra metalicznego oraz różnicami w strukturze lokalnej w obrębie metal-łącznik, materiały te wykazują odmienny mechanizm adsorpcji CO₂ w temperaturze 195 K (**Rysunek 10**). W przypadku UAM-1O materiał początkowo adsorbuje niewielką ilość CO₂ (~20 cm³/g) a następnie jego struktura pozostaje niezmienną aż do ciśnienia około 0,31 bara, powyżej którego następuje jej otwarcie, a maksymalne upakowanie osiąga wartość 150 cm³/g. Większa podatność na odkształcenia w przypadku materiału z siarką w kątowym łączniku dikarboksylowy powoduje, że nie obserwuje się wyraźnego plateau – struktura zmienia się proporcjonalnie do ilości adsorbowanego CO₂.

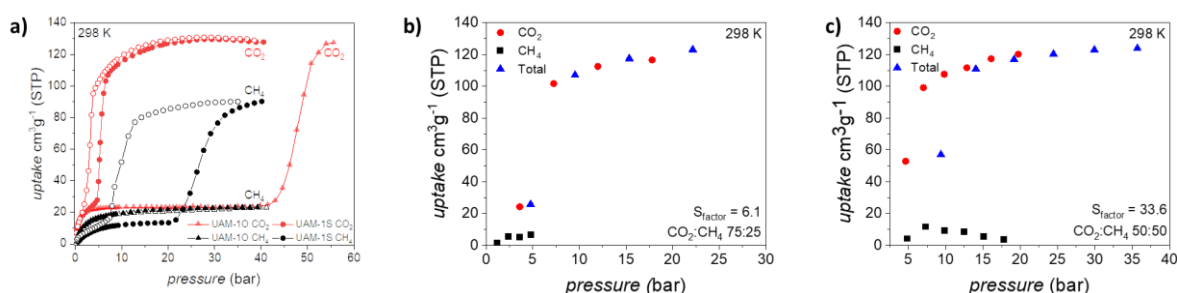


Rysunek 10 Mechanistyczne zrozumienie transformacji strukturalnej wywołanej przez adsorpcję CO₂ w UAM-1X (O – górny rząd; S – dolny rząd): **a)** adsorpcja CO₂ (pełne symbole) i desorpcja (puste symbole) w temperaturze 195 K w zestawieniu z **b)** odpowiadającymi im widmami PXRD mierzonymi *in situ* przy wybranych ciśnieniach CO₂ ($\lambda = 1,540599$ Å); **c)** pomiar *in situ* PXRD o wysokiej rozdzielczości czasowej podczas adsorpcji CO₂ w 195 K ($\lambda = 0,6199$ Å; dla zachowania spójności dane zostały przeliczone na $\lambda = 1,540599$ Å). Rysunek wykorzystano za zgodą redakcji.^[26]

Postawiłem hipotezę, że dla materiału UAM-1S obserwuję ciągły mechanizm adsorpcji, co potwierdziłem poprzez czasowo-rozdzielcze (kinetyczne) badania adsorpcji. Materiały zostały poddane działaniu ciśnienia wyższego niż ciśnienie przemiany strukturalnej, a w tym samym czasie rejestrowano niemal 100 dyfraktogramów proszkowych na sekundę. Pozwoliło to na uzyskanie czasowo-rozdzielczych dyfraktogramów proszkowych, które wykazały, że dla UAM-1O obserwuje się jedynie dwa stany, natomiast w przypadku UAM-1S przemiana pomiędzy stanami przebiega w sposób ciągły, z wieloma poziomami energetycznymi.

Zrozumienie mechanizmu otwarcia oraz różnicy energetycznej pomiędzy stanami ma istotne implikacje dla potencjalnych zastosowań. W pracy **H.6** wykazałem, że tylko UAM-1S, materiał wykazujący ciągłą zmianę bez organizacji klastra metalicznego, może być z powodzeniem użyty do magazynowania metanu w temperaturze pokojowej. W przypadku UAM-1O nie zaobserwowano „otwarcia” struktury w przypadku adsorpcji CH₄ (**Rysunek 11a**). Dodatkowo zauważyłem potencjalne okno adsorpcyjne dla materiału UAM-1S na izotermie jednoskładnikowej, które może umożliwiać rozdział metanu od dwutlenku węgla w temperaturze pokojowej. Dla 5 bar, UAM-S absorbuje około 120 cm³/g CO₂ natomiast w przypadku CH₄ jest adsorbowane około 7 cm³/g w przy tym samym ciśnieniu. W celu

potwierdzenia tego przeprowadziłem serię pomiarów dla mieszaniny CO₂/CH₄, co potwierdziło moje przypuszczenia (**Rysunek 11b-c**).

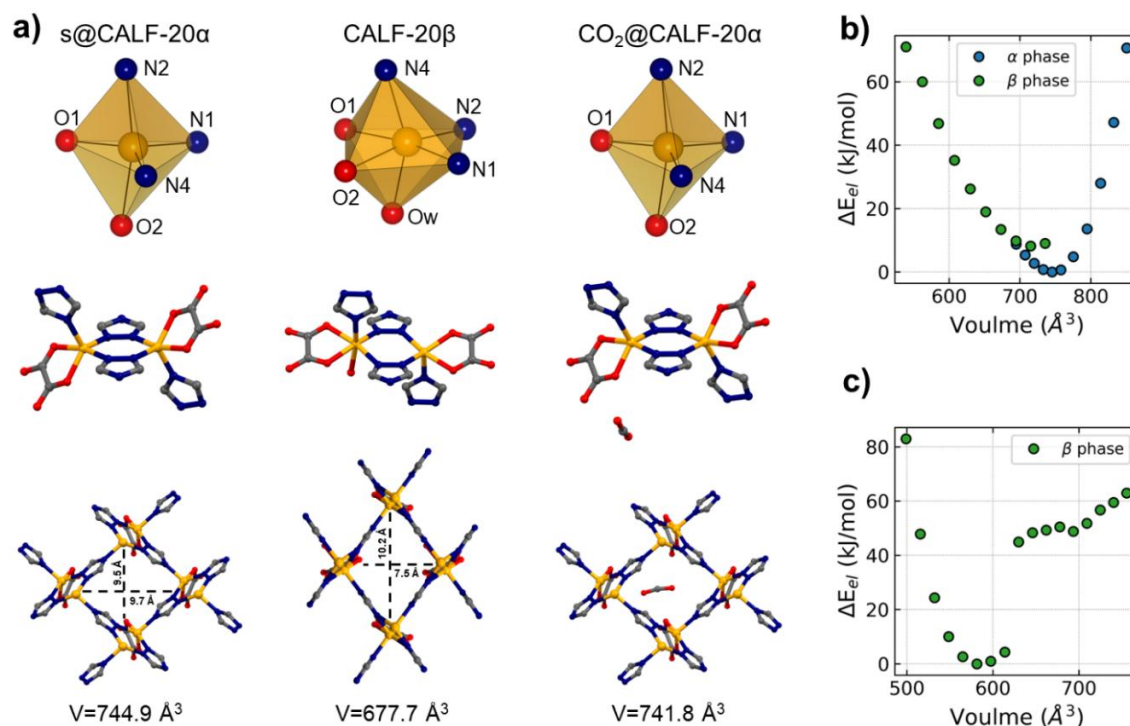


Rysunek 11 a) Potwierdzenie eksperymentalne faktu że ciągła transformacja jest efektywniejsza od dyskretniej w procesach separacji i dostarczania CH₄: pomiary adsorpcji pojedynczych gazów dla UAM-IX w 298 K; czerwony – CO₂, czarny – CH₄, pełne symbole – adsorpcja, puste symbole – desorpcja. Ze względu na wyjątkowo wysokie ciśnienie transformacji i wynikające z tego ograniczenia techniczne, nie zarejestrowano desorpcji CO₂ dla UAM-1O. **b) c)** Izotermiczne eksperymenty adsorpcji różnych mieszanin CO₂/CH₄ (75:25; 50:50 v/v) w materiale UAM-1S dla temperatury 298 K. Czarne kwadraty i czerwone kółka przedstawiają odpowiednio ciśnienie cząstkowe CO₂ i CH₄; niebieskie trójkąty – całkowitą zaadsorbowaną objętość. Wartość współczynnika selektywności obliczono na podstawie ostatniego punktu każdej izotermy. Rysunki zaadaptowano za zgodą redakcji.^[26]

W toku prowadzonych przeze mnie badań i nawiązanej współpracy badawczej opracowałem nowy elastyczny metal-organiczny szkielet oparty na ligandzie terpirodyńowym (publikacja **H.8**), który po usunięciu rozpuszczalnika przechodzi w strukturę nieporowatą, a następnie — w odpowiedzi na obecność CO₂ w temperaturze 195 K — otwiera się ponownie, tworząc fazę o właściwościach pamięci kształtu (shape-memory; **Rysunek 12**). Materiały tego typu, znane są głównie w kontekście polimerów i stopów metali. Charakteryzują się one zdolnością do odwracalnego przejścia z fazy zdeformowanej (metastabilnej) do energetycznie uprzywilejowanej fazy wyjściowej pod wpływem bodźców zewnętrznych. W kontekście materiałów porowatych, efekt shape-memory definiuje się jako zdolność materiału odkształcalnego do stabilizacji otwartej fazy porowatej po pierwszym cyklu adsorpcji.

Na podstawie szerokiego zakresu badań eksperymentalnych *in situ* (SC-XRD, PXRD) oraz obliczeń energetycznych metodą DFT, jak również w oparciu o dane literaturowe, zaproponowałem klasyfikację materiałów typu shape-memory MOF na dwie kategorie: responsywne oraz nierespowsywne. Dodatkowo, w tym artykule zwracam szczególną uwagę na zauważoną lukę metodologiczną w zakresie odkrywania i charakterystyki materiałów porowatych o właściwościach shape-memory, podkreślając znaczenie prowadzenia wielocyklowych pomiarów fizysorpcji dla dynamicznych ciał porowatych, zarówno w przypadku dynamicznych sieci metalo-organicznych jak dynamicznych sieci kowalencyjnych.

Trwałość CALF-20 została potwierdzona przez ponad 450 000 cykli adsorpcji pary wodnej. Ponadto, ten MOF można otrzymać w jednoetapowej reakcji z roztworu etanolu lub metanolu w temperaturze pokojowej. Co więcej, łatwo tworzy on kompozyt z polimerem i może być wytwarzany w skali wielotonowej. Interesujące właściwości CALF-20 wzbudziły duże zainteresowanie prowadząc do licznych badań eksperymentalnych i teoretycznych nad jego zdolnościami sorpcyjnymi.^[46–48]



Rysunek 13 Eksperymentalny wgląd w transformację materiału CALF-20: geometrie sfer koordynacyjnych kationów cynku (górný rząd), środowiska koordynacyjne Zn²⁺ (środkowy rząd) oraz widok trójwymiarowych sieci wzdłuż osi x (dolny rząd) dla α-CALF-20 ([Zn₂(ox)(trz)₂]·s; s – rozpuszczalnik) po syntezie, β-CALF-20 ([Zn₂(ox)(trz)₂(H₂O)]·s) po ogrzewaniu przez 10 dni w piecu oraz α-CALF-20-CO₂ ([Zn₂(ox)(trz)₂]-CO₂) powstającej w wyniku ekspozycji aktywowanego α-CALF-20 na CO₂ pod ciśnieniem 10 barów. Ow – atom tlenu z cząsteczki H₂O skoordynowanej do Zn. Zależność energii od objętości dla różnych faz CALF-20 w b) nieobecności oraz c) obecności cząsteczek wody. Atomów wodoru nie pokazano dla przejrzystości. W przypadku braku wody stabilna jest faza α. Rysunek zaadaptowano za zgodą redakcji.^[49]

Kryształy materiału CALF-20 o odpowiedniej wielkości do badań rentgenostrukturalnych powstają^[45] gdy 2,5-dihydroksybenzochinon ulega hydrolizie do anionu szczawianowego (ox), który w obecności jonów cynku (Zn²⁺) i triazolu (trz) tworzy pierwszą znaną krystaliczną fazę: α-CALF-20, Zn₂(ox)(trz)₂. Każdy jon Zn²⁺ jest połączony z trzema triazolatami i jednym szczawianem, tworząc zdeformowaną strukturę przypominającą trygonalną bipiramidę. Takie ułożenie powoduje powstanie pofałdowanych warstw, które są rozbudowane za pomocą łączników dikarboksylowych w trójwymiarową sieć o symetrii jednoskośnej. W sieci występują potencjalnie wolne przestrzenie o wymiarach 3,577 × 4,153 Å oraz 5,961 × 5,570 Å. Zajmują one 39,4% objętości komórki elementarnej.

W publikacji **H.9** wykazaliśmy, że ogrzewanie kryształów α-CALF-20 wystawionych na działanie powietrza w temperaturze 80 °C przez dziesięć dni wywołało przemianę typu kryształ-kryształ. Nowa faza, nazwana w tej rozprawie oraz w kolejnej publikacji (**H.10**) β-CALF-20 Zn₂(ox)(trz)₂(H₂O), wykazuje istotne zmiany strukturalne. Najważniejsza różnica między α-CALF-20, a β-CALF-20 dotyczy sfery koordynacyjnej jonów Zn²⁺. W β-CALF-20

sfera koordynacyjna cynku rozszerza się o cząsteczkę wody, która, co ciekawe, jest statystycznie związana tylko z połową jonów Zn^{2+} . Oznacza to zmianę liczby koordynacyjnej z 5 do 6 dla połowy kationów cynku w sieci krystalicznej, co skutkuje obecnością dwóch różnych geometrii sfer koordynacyjnych w tym samym kryształ β -CALF-20. Całkowita objętość wolnych przestrzeni spadła z 39.4% do zaledwie 11,7%.

Stabilność oraz możliwość przemiany jednej fazy w drugą zostały przez nas zbadane teoretycznie dzięki ekspertyzie profesora Randalem Snurra oraz dr. Filipa Formalika, z którymi nawiązałem współpracę. Badania DFT wykazały, że w warunkach suchych faza α -CALF-20 jest bardziej stabilna energetycznie niż β -CALF-20 – różnica wynosi 12,0 kJ/mol. Po wprowadzeniu cząsteczek wody, β -CALF-20 zyskuje niewielką stabilność równą 6,5 kJ/mol, dzięki koordynacji H_2O do cynku. Analiza zależności energii od objętości potwierdziła, że w suchym środowisku α -CALF-20 pozostaje bardziej stabilny, z przewagą 8,2 kJ/mol nad metastabilnym, bezwodnym β -CALF-20. Gdy objętość komórki β -CALF-20 przekracza 735 Å³, struktura staje się niestabilna i zmienia do fazy α . Analiza ścieżki przejścia fazowego wykazała brak bariery energetycznej dla tej transformacji. Zatem faza α jest jedyną stabilną formą CALF-20 w warunkach bezwodnych, co jest zgodne z obserwacjami eksperymentalnymi.

Praca **H.10** powstała w związku z dynamicznie rosnącym zainteresowaniem naukowym ukierunkowanym na badanie właściwości materiału CALF-20 – czego wyrazem jest ponad czterdzieści recenzowanych publikacji opublikowanych od 2021 roku w bazie Web of Science. Publikacja **H.10** stanowi kompleksowe opracowanie literatury dotyczącej tego układu w perspektywie ostatnich dziesięciu lat. W sposób systematyczny przedstawiliśmy zarówno rys historyczny związany z opracowaniem materiału, jak i aktualny stan wiedzy w zakresie jego elastyczności strukturalnej, stabilności chemicznej i termicznej, możliwości przetwórczych oraz potencjału w zakresie dostrajania właściwości fizykochemicznych. Zgromadzony i przeanalizowany materiał umożliwia pogłębione zrozumienie ewolucji badań nad CALF-20 oraz stanowi podstawę do krytycznej oceny jego i innych materiałów do wyłapywania CO_2 . Niniejsze opracowanie nie tylko podsumowuje istotne osiągnięcia w chemii materiału CALF-20, ale jest podstawą dla przyszłych badań ukierunkowanych na ocenę zastosowania materiałów porowatych w przemyśle. Fragmenty wstępów teoretycznych prac **H.9** i **H.10** zostały przeze mnie wykorzystane do stworzenia wstępu literaturowego.

Podsumowując, w toku realizacji programu badawczego udało mi się osiągnąć następujące istotne rezultaty:

1. Zidentyfikowałem mechanizm wpływu pojedynczych atomów na odpowiedź elastycznych MOF-ów (**H.3, H.4, H.5 i H.6**), wykazując, że lokalne modyfikacje mogą radykalnie zmieniać ich makroskopowe właściwości fizykochemiczne.
2. Opracowałem nowe funkcjonalne materiały porowate, wykazujące efekt shape-memory (**H.8**) oraz złożone transformacje fazowe indukowane adsorpcją gazów (**H.3, H4**).
3. Wdrożyłem i połączyłem zaawansowane techniki obliczeniowe oraz eksperymentalne, takie jak modelowanie DFT, GCMC, *in situ* spektroskopia NMR, dyfrakcja rentgenowska oraz spektroskopia IR, co pozwoliło mi na pełniejsze zrozumienie procesów lokalnych oraz globalnych odpowiedzi strukturalnej sieci MOF (prace poza **H.1, H3-H9**).
4. Zaprojektowałem system logiczny oparty na JUK-8 (**H.2**), który umożliwia detekcję jednoczesnej obecności dwóch gazów (H_2 i O_2) i wykazuje cechy bramki logicznej typu AND – stanowi to przykład wykorzystania materiałów elastycznych jako komponentów czujników chemicznych.
5. Wprowadziłem pierwszy protokół eksperymentalny i teoretyczny do wyznaczania przestrzennej dystrybucji atomów (**H4**) w strukturze dynamicznej JUK-8Br/ NO_2 .
6. Przyczyniłem się do wykazania, że materiał CALF-20 jest dynamiczną siecią metalo-organiczną (**H.9**) Dodatkowo, dokonałem przeglądu aktualnego stanu wiedzy na temat tego materiału, jednego z najbardziej obiecujących MOF-ów do zastosowań przemysłowych w separacji CO_2 , wskazując potencjalne kierunki dalszego rozwoju (**H.10**).
7. Dokonałem przeglądu literaturowego wielokomponentowych dynamicznych porowatych materiałów wskazując potencjalne kierunki dalszego rozwoju (**H.5**).

Wkład w rozwój dziedziny

W ramach prowadzonych badań wniosłem istotny wkład w rozwój chemii dynamicznych materiałów metalo-organicznych, w szczególności poprzez:

1. Zdefiniowanie i eksperymentalne potwierdzenie wpływu lokalnych modyfikacji na makroskopowe właściwości dynamicznych MOF-ów. Wykazałem, że subtelne zmiany składu (np. podstawienie pojedynczego atomu halogenu lub wymiana tlenu na siarkę) mogą prowadzić do istotnych różnic w mechanizmach transformacji strukturalnej indukowanej przez adsorpcję. Prace te tworzą nowy paradygmat w rozumieniu „chemii lokalnej” w materiałach porowatych.

2. Rozwój metodologii badania przestrzennej dystrybucji składników w odkształcalnych MTV-MOF-ach. Opracowałem pierwszy kompletny protokół łączący eksperymenty, SC-XRD i NMR w ciele stałym z teorią, umożliwiając mapowanie przestrzennego rozmieszczenia łączników w materiałach dynamicznych. Praca ta wypełnia lukę badawczą w charakterystyce lokalnej struktury materiałów multikomponentowych.
3. Wprowadzenie koncepcji logiki molekularnej opartej na MOF-ach. Po raz pierwszy zastosowałem dynamiczny MOF jako element logiczny typu AND, reagujący na obecność dwóch gazów (H_2 i O_2). Pokazałem, że materiały elastyczne mogą pełnić rolę aktywnych komponentów inteligentnych sensorów, co otwiera nową ścieżkę w dziedzinie chemii materiałowej i materiałów responsywnych.
4. Charakteryzacja i klasyfikacja efektu shape-memory w MOF-ach i COF-ach. Na podstawie badań nad nowym szkieletem opartym na terpierydynie zaproponowałem podział materiałów shape-memory MOF na klasy „responsywne” i „nieresponsywne”. Dodatkowo wykazałem potrzebę wprowadzenia spójnej metodologii celu identyfikacji tego zjawiska.
5. Analiza strukturalna i teoretyczna przemian fazowych w CALF-20. W ramach współpracy międzynarodowej wraz z Prof. UAM A. Janiak przeprowadziłem pierwsze badania transformacji α - β w materiale CALF-20 oraz wykazałem, że jest on dynamiczną siecią metalo-organiczną.
6. Przedstawienie podejścia holistycznego w badaniach nad dynamicznymi MOF-ami. Zaprezentowane badania opierają się na synergii eksperymentu (synteza, charakterystyka *in situ*, spektroskopia) i teorii (DFT, GCMC), co stanowi modelowe podejście do nowoczesnych badań materiałowych.

Dzięki powyższym osiągnięciom udało się nie tylko rozszerzyć granice wiedzy o dynamicznych MOF-ach, lecz również stworzyć nowe narzędzia i ramy koncepcyjne dla kolejnych badaczy zajmujących się krystalicznymi dynamicznymi materiałami porowatymi, niezależnie od ich typu.

Dalsze perspektywy rozwoju

Perspektywy rozwoju zostały zaprezentowane w projekcie badawczym zatytułowanym „Synteza dynamicznych tiazolotiazolowych sieci metalo-organicznych do magazynowania i

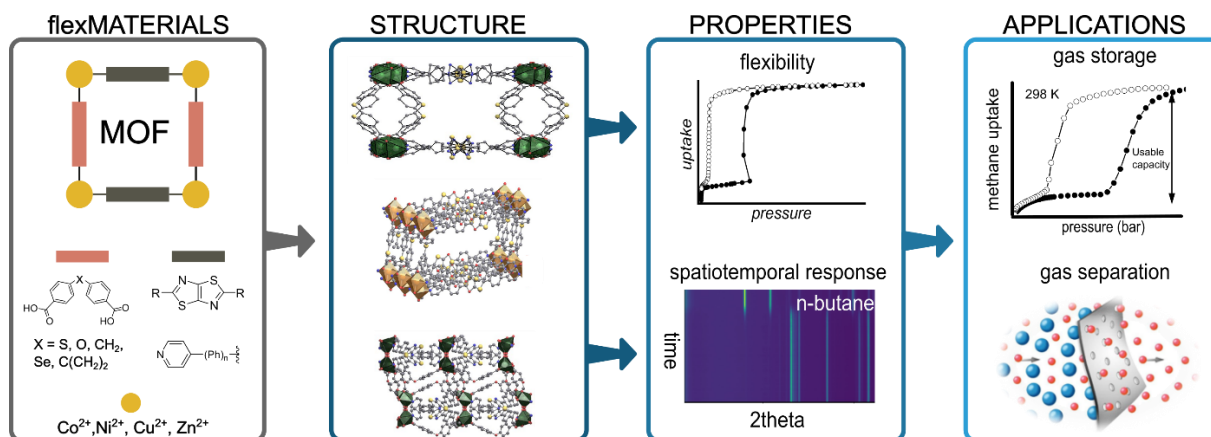
separacji gazowych węglowodorów. W celu przedstawienia koncepcji tych badań czytelnikowi prezentuję zwięzły opis.

W przyszłych badaniach planuję zrozumieć i kontrolować właściwości adsorpcyjne elastycznych sieci metalo-organicznych opartych na układzie tiazol-tiazolowym pod kątem magazynowania i separacji lekkich węglowodorów. Kluczowe aspekty obejmują zrozumienie selektywności, czasu odpowiedzi oraz kontrolę całkowitej pojemności i mechanizmu adsorpcji. Aby osiągnąć te cele, będę pogłębiać wiedzę na temat niedawno opracowanej platformy „UAM-1,^[26] oraz projektować i syntezować nowe elastyczne materiały tiazol-tiazolowe o zadanych właściwościach fizykochemicznych.

Podczas badań zamierzam monitorować zmiany strukturalne wywołane różnymi bodźcami przy użyciu zaawansowanych technik eksperymentalnych, takich jak czasowo-rozdzielcza *in situ* dyfrakcja rentgenowska oraz spektroskopia Ramana, a także równowagowe pomiary *in situ* PXRD i dyfrakcja rentgenowska na monokryształach podczas procesu adsorpcji węglowodorów. Eksperymenty będą wspierane metodami teoretycznymi, w tym obliczeniami DFT oraz symulacjami GCMC prowadzonymi w współpracy z grupą Profesora Bogdana Kuchty.

Aby przybliżyć czytelnikowi zwięźle, co dokładnie zostanie zbadane podczas pracy w tym projekcie przekładam schemat zawierający najważniejszą informację (**Rysunek 14**) oraz dwie hipotezy będące podwaliną badań:

- **Pierwsza hipoteza** zakłada, że ciągły mechanizm oddychania elastycznych sieci MOF umożliwi bardziej efektywną separację i magazynowanie lekkich węglowodorów przy niższych kosztach energetycznych w porównaniu do materiałów o skokowej zmianie strukturalnej lub sztywnych porowatych struktur.
- **W drugiej hipotezie** badawczej stwierdzam, że miejsca wiążące w elektronowo deficytowych układach tiazol-tiazolanowych pozwolą na silne oddziaływania tego ugrupowania względem cząsteczek bogatych w elektrony, takich jak nienasycone węglowodory. Ta interakcja umożliwi bezprecedensową selektywną separację, na przykład usuwanie śladowych ilości acetylenu z etylenu lub rozdział propanu i propylenu.



Rysunek 14 Graficzne przedstawienie głównych celów projektu: synteza łączników i elastycznych porowatych materiałów, struktura, właściwości oraz proponowane zastosowanie.

W wyniku prowadzonych badań w tym projekcie powstała pierwsza praca, która dokładnie tłumaczy różnice w fizykochemii między izostrukturnymi materiałami UAM-1S i UAM-1O (H.7). Kolejne prace są przygotowywane.

6. Istotna aktywność naukowa realizowana w więcej niż jednej uczelni i instytucji naukowej w szczególności zagranicznej.

Swoją działalność badawczą rozpocząłem w 2014 roku wraz z rozpoczęciem doktoratu na Uniwersytecie Jagiellońskim w Krakowie. W jego trakcie odbyłem dwa staże zagraniczne w grupie prof. Stefana Kaskela, jeden ze staży był możliwy dzięki uzyskanemu finansowaniu z programu Etiuda (NCN). Następnie, uzyskując finansowanie w konkursie Sonatina Narodowego Centrum Nauki (pierwsza pozycja na liście rankingowej), rozpocząłem pracę na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. W tym okresie odbyłem kilka staży zagranicznych, m.in. na Uniwersytecie w Getyndze, Politechnice Drezdeńskiej, Uniwersytecie Autonomicznym w Barcelonie, Uniwersytecie Ludwika Maksymiliana w Monachium oraz Uniwersytecie w Limeryku. Co istotne na Uniwersytecie Adama Mickiewicza w Poznaniu nie posiadałem, żadnego aparatu do sorpcji przez co moje badania musiały polegać na współpracy. Obecnie dzięki uzyskanemu finansowaniu udało mi się pozyskać pierwszy wolumetryczny aparat sorpcji oraz zbudować zaczątki nowoczesnego laboratorium badań ciał porowatych.

Poza pracami H.5 i H.10 (o charakterze przeglądowym; artykuły na zaproszenie), wszystkie pozostałe publikacje są efektem międzynarodowej współpracy naukowej, którą udało mi się nawiązać dzięki prowadzonej działalności badawczej. Warto zwrócić szczególną uwagę na pracę H.8, będącą wynikiem współpracy kilku zespołów badawczych z Włoch, Niemiec, Polski, RPA, Iranu oraz Stanów Zjednoczonych.

Dzięki holistycznemu podejściu, angażującemu zarówno grupy teoretyczne, jak i eksperymentalne, możliwe jest stosowanie zaawansowanych metod badawczych oraz opracowywanie nowych protokołów dla złożonych problemów. Przykładem takiego podejścia jest praca H.4, w której, w celu wprowadzenia do literatury pierwszego teoretyczno-eksperymentalnego protokołu wyznaczania przestrzennej dystrybucji atomów w dynamicznych sieciach MOF, nawiązałem współpracę z Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi.

Dodatkowo, dzięki uzyskanemu grantowi aparaturowemu i obliczeniowemu, część badań prezentowanych w rozprawie habilitacyjnej została zrealizowana z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego (BESSY) w Berlinie oraz infrastruktury PL-Grid.

Podsumowując, artykuły D.1–D.13 powstały w trakcie mojej pracy na Uniwersytecie Jagiellońskim, natomiast pozostałe publikacje (D.14–D.17 oraz H.1–H.10) zostały opracowane w ramach działalności badawczej na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu.

7. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę

Działalność organizacyjna

W ramach działalności organizacyjnej brałem aktywny udział w przygotowaniu krajowych i międzynarodowych wydarzeń naukowych. Pełniłem funkcję członka komitetu organizacyjnego 35th European Crystallographic Meeting (2025) oraz sekretarza 17th International Seminar on Inclusion Compounds and Porous Materials (2024). W 2019 roku byłem przewodniczącym komitetu Young Investigator Symposium, wydarzenia satelitarnego towarzyszącego 4th European Conference on Metal-Organic Frameworks and Porous Polymers. Wcześniej uczestniczyłem w organizacji konferencji Horizons of Science: Forum of Diploma Thesis Conference (2016, 2017) oraz międzynarodowego spotkania ECOSTC „BioExplicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry” (2016). Podejmowane działania świadczą o moim konsekwentnym zaangażowaniu w rozwój środowiska naukowego oraz promowaniu wymiany wiedzy i współpracy międzynarodowej.

Działalność dydaktyczna

Od początku zatrudnienia na stanowisku adiunkt naukowo-dydaktyczny (2013 r.) realizuję obowiązki dydaktyczne (210 godzin / rocznie), prowadząc zajęcia laboratoryjne i rachunkowe z fizyki oraz zajęcia laboratoryjne z chemii fizycznej. Podczas studiów doktoranckich na

Wydziale Chemii UJ prowadziłem zajęcia laboratoryjne z Chemii Nieorganicznej (90 godzin / rocznie).

W ramach tej działalności staram się łączyć wysoki poziom merytoryczny z rozwijaniem umiejętności praktycznych studentów, wspierając ich w pogłębianiu wiedzy oraz samodzielnym myśleniu naukowym.

Upowszechnianie wyników badań

Wyniki moich badań były szeroko promowane poprzez liczne wykłady i prezentacje na prestiżowych konferencjach międzynarodowych oraz seminariach instytucjonalnych. W szczególności prezentowałem je m.in. na konferencjach MOF w Singapurze (2024) i Dreźnie (2022), ICCO w Rimini (2022), a także w instytucjach akademickich takich jak Uniwersytet Ludwiga Maksymiliana w Monachium, Uniwersytet w Getyndze, Uniwersytet Warszawski czy Uniwersytet w Limeryk. Wystąpienia te służyły nie tylko upowszechnianiu wyników badań, lecz również budowaniu międzynarodowej rozpoznawalności i sieci współpracy.

8. Dodatkowe osiągnięcia naukowe i szkolenia

Dane scjentometryczne całkowitego dorobku⁵

Łączny impact factor wszystkich publikacji: 166,294

Liczba cytowań publikacji:

- łącznie: 365 (Web of Science); 376 (Scopus); 435 (Google Scholar)
- bez autocytowań: 300 (Web of Science); 311 (Scopus)
- indeks Hirscha (h-index): 12 (Web of Science); 12 (Scopus); 14 (Google Scholar)

Artykuły ujęte w doktoracie⁶

D.1 K. Roztocki, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Carboxylate-Hydrazone Mixed-Linker Metal-Organic Frameworks: Synthesis, Structure, and Selective Gas Adsorption, Eur. J. Inorg. Chem. 2016 (27) (2016) 4450-4456. <https://doi.org/10.1002/ejic.201600134>. IF₂₀₁₆ = 2,444

D.2 K. Roztocki, D. Jędrzejowski, M. Hodorowicz, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Isophthalate-Hydrazone 2D Zinc-Organic Framework: Crystal Structure, Selective Adsorption, and Tuning of Mechanochemical Synthetic Conditions, Inorg. Chem. 55 (19) (2016) 9663-9670. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b01405>. IF₂₀₁₆ = 4,820

D.3 K. Roztocki, D. Jędrzejowski, M. Hodorowicz, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Effect of Linker Substituent on Layers Arrangement, Stability, and Sorption of Zn-Isophthalate/Acylhydrazone Frameworks, Cryst. Growth Des. 18 (1) (2018) 488-497. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.7b01468>. IF₂₀₁₈ = 4,153

D.4 K. Roztocki, M. Lupa, M. Hodorowicz, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Bulky substituent and solvent-induced alternative nodes for layered Cd-isophthalate/acylhydrazone frameworks, CrystEngComm 20 (20) (2018) 2841-2849. <https://doi.org/10.1039/c8ce00269j>. IF₂₀₁₈ = 3,382

⁵ 27.08.2025

⁶ Doktorat stanowił cykl sześciu powiązanych tematycznie publikacji naukowych oraz uzyskał nagrodę Prezesa Rady Ministrów za najlepszą pracę doktorską (2019 r.)

D.5 K. Roztocki, M. Lupa, A. Sławek, W. Makowski, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Water-Stable Metal-Organic Framework with Three Hydrogen-Bond Acceptors: Versatile Theoretical and Experimental Insights into Adsorption Ability and Thermo-Hydrolytic Stability, *Inorg. Chem.* 57 (6) (2018) 3287-3296. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b00078>. IF₂₀₁₈ = 4,850

D.6 K. Roztocki, M. Szufla, M. Hodorowicz, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Introducing a Longer versus Shorter Acylhydrazone Linker to a Metal-Organic Framework: Parallel Mechanochemical Approach, Nonisorecticular Structures, and Diverse Properties, *Cryst. Growth Des.* 19 (12) (2019) 7160-7169. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01031>. IF₂₀₁₉ = 4,089

Pozostałe artykuły naukowe

D.7 K. Roztocki, D. Matoga, J. Szklarzewicz, Copper(II) complexes with acetone picolinoyl hydrazones: Crystallographic insight into metalloligand formation, *Inorg. Chem. Commun.* 57 (2015) 22-25. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2015.04.019>. IF₂₀₁₆ = 1,640

D.8 K. Roztocki, D. Matoga, W. Nitek, Cobalt(II) compounds with acetone isonicotinoyl hydrazone tautomers: Syntheses and crystal structures of complexes with free donor atoms, *Inorg. Chim. Acta* 448 (2016) 86-92. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.03.045>. IF₂₀₁₆ = 2,002

D.9 D. Matoga, K. Roztocki, M. Wilke, F. Emmerling, M. Oszejca, M. Fitta, M. Bałanda, Crystalline bilayers unzipped and reziped: Solid-state reaction cycle of a metal-organic framework with triple rearrangement of intralayer bonds, *CrystEngComm* 19 (22) (2017) 2987-2995. <https://doi.org/10.1039/c7ce00655a>. IF₂₀₁₇ = 3,304

D.10 M. Szufla, K. Roztocki, A. Krawczuk, D. Matoga, One-step introduction of terminal sulfonic groups into a proton-conducting metal-organic framework by concerted deprotonation-metalation-hydrolysis reaction, *Dalton Trans.* 49 (29) (2020) 9953-9956. <https://doi.org/10.1039/d0dt02017f>. IF₂₀₂₀ = 4,390

- D.11 K. Roztocki, M. Szufla, V. Bon, I. Senkovska, S. Kaskel, D. Matoga, Interlinker Hydrogen Bonds Govern CO₂ Adsorption in a Series of Flexible 2D Diacylhydrazone/Isophthalate-Based MOFs: Influence of Metal Center, Linker Substituent, and Activation Temperature, *Inorg. Chem.* 59 (15) (2020) 10717-10726. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c01182>. IF₂₀₂₀ = 4,825
- D.12 K. Roztocki, F. Formalik, A. Krawczuk, I. Senkovska, B. Kuchta, S. Kaskel, D. Matoga, Collective Breathing in an Eightfold Interpenetrated Metal–Organic Framework: From Mechanistic Understanding towards Threshold Sensing Architectures, *Angew. Chem. Int. Ed.* 59 (11) (2020) 4491-4497. <https://doi.org/10.1002/anie.201914198>. IF₂₀₂₀ = 15,336
- D.13 A. Sławek, K. Roztocki, D. Majda, S. Jaskaniec, T.J.H. Vlught, W. Makowski, Adsorption of n-alkanes in ZIF-8: Influence of crystal size and framework dynamics, *Microporous Mesoporous Mater.* 312 (2021) 110730. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110730>. IF₂₀₂₁ = 5,876
- D.14 B. Mazur, F. Formalik, K. Roztocki, V. Bon, S. Kaskel, A.V. Neimark, L. Firlej, B. Kuchta, Quasicontinuous Cooperative Adsorption Mechanism in Crystalline Nanoporous Materials, *J. Phys. Chem. Lett.* 13 (30) (2022) 6961-6965. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.2c01752>. IF₂₀₂₂ = 5,700
- D.15 P. Fernández-Seriñán, K. Roztocki, V. Safarifard, V. Guillermin, S. Rodríguez-Hermida, J. Juanhuix, I. Imaz, A. Morsali, D. Maspoch, Modulation of the Dynamics of a Two-Dimensional Interweaving Metal-Organic Framework through Induced Hydrogen Bonding, *Inorg. Chem.* 63 (12) (2024) 5552-5558. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.3c04522>. IF₂₀₂₃ = 4,000
- D.16 A. Khobotov-Bakishev, P. Samanta, K. Roztocki, J. Albalad, S. Royuela, S. Furukawa, F. Zamora, A. Carné-Sánchez, D. Maspoch, Post-Synthetic Modification of Aerogels Made of Covalent Cross-linked Metal-Organic Polyhedra, *Adv. Funct. Mater.* 34 (8) (2024) 2312166. <https://doi.org/10.1002/adfm.202312166>. IF₂₀₂₃ = 18,500

D.17 W. Makowski, P. Gryta, G. Jajko, P. Rodlamul, D. Jędrzejowski, K. Roztocki, D. Matoga, Co-Adsorption of Alcohols and Water in JUK-8 Studied Using Quasi-Equilibrated Thermodesorption, *Molecules* 29 (10) (2024) 2309. <https://doi.org/10.3390/molecules29102309>. IF₂₀₂₃ = 4,2000

D.18 B. Kuchta, M. Stankiewicz, A. Dorhauer, C. Wexler, K. Roztocki, B. Mazur, L. Firlej, S. Kaskel, V. Bon; Adsorption mechanism in crystalline micropores: multimodal fluctuations, phase coexistence and phase transformations in nanoconfinement, preprint

Patenty

- US 15/318,678, 2018
- PL 232317 B1
- EP 3 154 987 B1

Zgłoszenia patentowe

- P.443983

Nagrody i wyróżnienia

- 2021–2024 Stypendium dla wybitnych młodych naukowców Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego
- 2021 Nagroda START Fundacji na rzecz Nauki Polskiej
- 2019 Nagroda Prezesa Rady Ministrów za najlepszą rozprawę doktorską
- 2019 Stypendium Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej „PROM Program”
- 2012–2014 Stypendium KNOW (Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego), Kraków
- 2009–2012 Stypendium Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach programu „Zwiększenie liczby wysoko wykwalifikowanych absolwentów

Kierowanie projektami badawczymi

- *Synteza sieci metalo-organicznych Zn-MOF i Cd-MOF o mieszanych łącznikach z grupy acylohydrazonów i dikarboksylianów*
 - Konkurs: ETIUDA (NCN)
 - Przyznana kwota: 109 352 PLN

- Rezultat: 4 publikacje z listy filadelfijskiej
- *Nanoinżynieria multifunkcyjnych dynamicznych sieci metalo-organicznych (flexMOFs) do procesów separacji: podejście eksperymentalne i teoretyczne*
 - Konkurs: SONATINA (NCN); pierwsza pozycja na liście rankingowej
 - Przyznana kwota: 759 792 PLN
 - Rezultat: 12 publikacji z listy filadelfijskiej
- *Synteza dynamicznych tiazolotiazolowych sieci metalo-organicznych do magazynowania i separacji gazowych węglowodorów (w trakcie realizacji)*
 - Konkurs: OPUS (NCN)
 - Przyznana kwota: 1 510 116 PLN
 - Rezultat: w dniu składania wniosku jedna praca w JACS
- *Kontrola właściwości dynamicznych sieci metalo-organicznych*
 - Konkurs: 50 grantów dla Młodych Naukowców (UAM)
 - Przyznana kwota: 50 000 PLN

Projekty aparaturowe i obliczeniowe

- Czas pomiarowy na synchrotronie „BESSY II Light Source” na wiązce KMC-2; 96h
- Czas obliczeniowy na klastrze Bem2 (Pl-Grid); PLG/2025/018606, 500000h

Staże zagraniczne

- 10.2024 Limerick University, 1 miesiąc
- 10.2024 Ludwig-Maximilians-Universität München, 1 miesiąc
- 11.2023 Technische Universität Dresden, 1 miesiąc
- 11.2022 Universitat Autònoma de Barcelona, ICN2, Barcelona, 7 miesięcy
- 05.2022 University of Göttingen, 2 miesiące
- 02.2022 Technische Universität Dresden, 2 miesiące
- 01.2019 Technische Universität Dresden, 6 miesięcy
- 06.2018 Technische Universität Dresden, 3 miesiące

Współpraca z przemysłem

- 2013 – Staż naukowy, Instytut Nafty i Gazu, Krosno, Polska
- 2014 – Współpraca z ABB Ltd (Asea Brown Boveri Ltd), Kraków, Polska

Opiekun pomocniczy

- mgr Szymon Sobczak (doktorant, 2022–2026)
- mgr Wiktoria Gromelska (doktorantka, 2022–2026)

Opieka nad studentami studiów licencjackich i magisterskich

- 2022 – Szymon Sobczak (mgr)
- 2022 – Wiktoria Gromelska (mgr)
- 2019 – Monika Szufla (mgr)
- 2018 – Magdalena Lupa (mgr)
- 2018 – Damian Jędrzejowski (lic.)
- 2017 – Monika Szufla (lic.)
- 2016 – Magdalena Lupa (lic.)
- 2015 – Katarzyna Szuster (lic.)

Rozdziały w książkach

- *The dynamic view: Multiscale Characterization Techniques for Flexible Frameworks*, w: *Flexible Metal-Organic Frameworks: Structural Design, Synthesis and Properties*, red. Susumu Kitagawa, 2024

Działalność organizacyjna

- 2024-2025 – organizacja wykładów zaproszonych prelegentów – uznanych naukowców z zagranicy i z Polski, w tym:
 - dr hab. Maura Malńska,
 - dr hab. Volodymyr Bon,
 - prof. Dana Medina.
- 2024-2028 – Rada Naukowa Dyscypliny Nauki Chemiczne, UAM
- 2025 – 35th European Crystallographic Meeting
- 2024 – Sekretarz 17th International Seminar on Inclusion Compounds and Porous Materials
- 2019 – Przewodniczący Young Investigator Symposium Committee (wydarzenie satelitarne do 4th European Conference on Metal-Organic Frameworks and Porous Polymers)
- 2019 – German Zeolite Conference, Dresden

- 2017 – Horizons of Science: Forum of Diploma Thesis Conference, Kraków
- 2016 – ECOSTC BioExplicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry, Kraków
- 2016 – Horizons of Science: Forum of Diploma Thesis Conference, Kraków

Spotkania z inkubatorami, przemysłem i Urzędem Patentowym

- 12.2023 – Innovation Academy: From Science to Startup

Wybrane wykłady i prezentacje

- 07.2025 – Uniwersytet w Limeryk, Irlandia, wykład
- 10.2024 – Uniwersytet Ludwiga Maksymiliana w Monachium, Niemcy, wykład
- 09.2024 – 9th International Conference on Metal-Organic Frameworks and Open Framework Compounds, Singapur
- 06.2024 – 24th Zeolite Forum, Polska
- 02.2024 – Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Polska
- 12.2023 – FlexMOF Symposium, Niemcy, wykład na zaproszenie
- 11.2023 – 3P Instruments Online Adsorption Meeting
- 07.2023 – Crystallographic Colloquium, Wrocław, Polska
- 09.2022 – 8th International Conference on Metal-Organic Frameworks and Open Framework Compounds, Drezno
- 08.2022 – 44th International Conference on Coordination Chemistry, Rimini, Włochy
- 10.2022 – Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Polska, seminarium wydziałowe
- 05.2022 – Uniwersytet w Getyndze, Niemcy, wykład
- 02.2022 – Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Polska, seminarium wydziałowe
- 01.2022 – Politechnika Wrocławska, Polska, seminarium wydziałowe
- 11.2021 – 3P Instruments Online Adsorption Meeting, prezentacja online
- 06.2021 – Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu, Centrum Zaawansowanych Technologii, Polska (wykład)
- 06.2019 – Villa del Grumello, Como, Włochy First International School on Advanced Porous Materials, prezentacja ustna

- 12/2016 – 20th International Winter School on Coordination Chemistry, Polska
- 12/2014 – 19th International Winter School on Coordination Chemistry, Polska

Wybrane prezentacje posterowe

- 08/2024 – 17th International Seminar on Inclusion Compounds and Porous Materials
- 10/2023 – Granada, Hiszpania, 5th European Conference on Metal Organic Frameworks and Porous Polymers
- 10/2019 – Paryż, Francja, 3th European Conference on Metal Organic Frameworks and Porous Polymers
- 05/2018 – Academy Center TUM Raitenhaslach, Niemcy, docMOF-2018: A PhD-run Symposium
- 10/2017 – Delft, 2nd The Netherlands, European Conference on Metal Organic Frameworks and Porous Polymers
- 10/2015 – Potsdam, Germany, 1st European Conference on Metal Organic Frameworks and Porous Polymers
- 11/2015 – Krakow, Poland, 2nd International Conference on Functional Molecular Materials (FUNMAT2015)
- 06/2014 – Warsaw, Poland, International Symposium on Nanostructured Functional Materials

Projekty badawcze, główny wykonawca

- 06.2016 – 12.2019 – „Poszukiwanie przewodników protonowych MOF z podejściem mechanochemicznym” NCN, OPUS
- 06.2013 – 06.2016 – „Sieci metalo-organiczne MOF oparte na polifunkcyjnych ligandach hydrazonowych: synteza, struktura i właściwości fizykochemiczne” NCN, OPUS

Recenzje artykułów naukowych oraz projektów badawczych

- Ekspert FENG
- Swiss National Science Foundation
- Journal of the American Chemical Society (3)
- Chemistry of Materials (1)
- Chemical Communication (1)

- Journal of Molecular Structure (2)
- CrystEngComm (1)
- Dalton (1)
- Discover Sensors; Springer Nature (1)
- Ewaluacja prac magisterskich studentów programu Erasmus Mundus

Rozwój kompetencji miękkich

- 10.2019 – „Metodologia Lean Six Sigma” (Yellow Belt)
- 01.2019 – „Microsoft Excel Poziom 3”, HCL Poland
- 10.2018 – „Praca w środowisku wielokulturowym”, Alexander Man Solution
- 11.2017 – 01.2018 – „Jak zbudować empatyczne miejsce pracy?”, Uniwersytet Jagielloński
- 05.2017 – „Informacja zwrotna – klucz do Twojego rozwoju i wzrostu”, Philip Morris International
- 04.2017 – 05.2017 – „Prezentacja i moderacja”, Instytut Psychologii UJ
- 06.2016 – „Autoprezentacja”, Capgemini Corporation
- 02.2016 – „Szkolenie z zarządzania czasem”, NC+
- 01.2016 – „Siła rozmowy; Jak osiągnąć sukces?”, Tivron Company

Dydaktyka

- Fizyka, zajęcia laboratoryjne oraz rachunkowe
- Chemia Fizyczna, zajęcia laboratoryjne
- Chemia Nieorganiczna, zajęcia laboratoryjne

Skrypty dla studentów

- A Jurowska, K Jurowski, K Kochan, K Roztocki, *Obliczenia spektroskopowe i spektrometryczne okiem młodych naukowców*, 2015

Literatura

- [1] G. T. Pecl, M. B. Araújo, J. D. Bell, J. Blanchard, T. C. Bonebrake, I.-C. Chen, T. D. Clark, R. K. Colwell, F. Danielsen, B. Evengård, L. Falconi, S. Ferrier, S. Frusher, R. A. Garcia, R. B. Griffis, A. J. Hobday, C. Janion-Scheepers, M. A. Jarzyna, S. Jennings, J. Lenoir, H. I. Linnetved, V. Y. Martin, P. C. McCormack, J. McDonald, N. J. Mitchell, T. Mustonen, J. M. Pandolfi, N. Pettorelli, E. Popova, S. A. Robinson, B. R. Scheffers, J. D. Shaw, C. J. B. Sorte, J. M. Strugnell, J. M. Sunday, M.-N. Tuanmu, A. Vergés, C. Villanueva, T. Wernberg, E. Wapstra, S. E. Williams, *Science* **2017**, 355, eaai9214.
- [2] D. Breitburg, L. A. Levin, A. Oschlies, M. Grégoire, F. P. Chavez, D. J. Conley, V. Garçon, D. Gilbert, D. Gutiérrez, K. Isensee, G. S. Jacinto, K. E. Limburg, I. Montes, S. W. A. Naqvi, G. C. Pitcher, N. N. Rabalais, M. R. Roman, K. A. Rose, B. A. Seibel, M. Telszewski, M. Yasuhara, J. Zhang, *Science* **2018**, 359, eaam7240.
- [3] R. E. Baker, A. S. Mahmud, I. F. Miller, M. Rajeev, F. Rasambainarivo, B. L. Rice, S. Takahashi, A. J. Tatem, C. E. Wagner, L.-F. Wang, A. Wesolowski, C. J. E. Metcalf, *Nat Rev Microbiol* **2022**, 20, 193–205.
- [4] W. Steffen, J. Grinevald, P. Crutzen, J. McNeill, *Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci.* **2011**, 369, 842–867.
- [5] A. Haines, K. Ebi, *NEJM* **2019**, 380, 263–273.
- [6] D. Sholl, R. P. Lively, *Nature* **2016**, 532, 435.
- [7] I. Senkovska, V. Bon, A. Mosberger, Y. Wang, S. Kaskel, *Advanced Materials* **2025**, n/a, 2414724.
- [8] Batten Stuart R., Champness Neil R., Chen Xiao-Ming, Garcia-Martinez Javier, Kitagawa Susumu, Öhrström Lars, O’Keeffe Michael, Paik Suh Myunghyun, Reedijk Jan, *pac* **2013**, 85, 1715.
- [9] M. Antonietti, *Angewandte Chemie International Edition* **2020**, n/a, DOI 10.1002/anie.201913325.
- [10] J.-R. Li, J. Sculley, H.-C. Zhou, *Chemical Reviews* **2012**, 112, 869–932.
- [11] S. K. Sobczak, J. Drwęska, W. Gromelska, K. Roztocki, A. M. Janiak, *Small* **2024**, n/a, 2402486.
- [12] Z. Chang, D.-H. Yang, J. Xu, T.-L. Hu, X.-H. Bu, *Advanced Materials* **2015**, 27, 5432–5441.
- [13] S. Kitagawa, Ed., *Flexible Metal–Organic Frameworks: Structural Design, Synthesis and Properties*, Royal Society Of Chemistry, **2024**.
- [14] M. Thommes, K. Kaneko, A. V. Neimark, J. P. Olivier, F. Rodriguez-Reinoso, J. Rouquerol, K. S. W. Sing, *Pure and Applied Chemistry* **2015**, 87, 1051–1069.
- [15] V. Van Speybroeck, G. Maurin, *Nature Materials* **2023**, 22, 12–13.
- [16] V. Bon, J. Pallmann, E. Eisbein, H. C. Hoffmann, I. Senkovska, I. Schwedler, A. Schneemann, S. Henke, D. Wallacher, R. A. Fischer, G. Seifert, E. Brunner, S. Kaskel, *Microporous and Mesoporous Materials* **2015**, 216, 64–74.
- [17] S. Krause, V. Bon, I. Senkovska, U. Stoeck, D. Wallacher, D. M. Többs, S. Zander, R. S. Pillai, G. Maurin, F.-X. Coudert, S. Kaskel, *Nature* **2016**, 532, 348.
- [18] E. Jin, I. S. Lee, D. C. Yang, D. Moon, J. Nam, H. Cho, E. Kang, J. Lee, H.-J. Noh, S. K. Min, W. Choe, *Nature Communications* **2023**, 14, 7938.
- [19] A. P. Katsoulidis, D. Antypov, G. F. S. Whitehead, E. J. Carrington, D. J. Adams, N. G. Berry, G. R. Darling, M. S. Dyer, M. J. Rosseinsky, *Nature* **2019**, 565, 213–217.
- [20] J. Rabone, Y.-F. Yue, S. Y. Chong, K. C. Stylianou, J. Bacsá, D. Bradshaw, G. R. Darling, N. G. Berry, Y. Z. Khimyak, A. Y. Ganin, P. Wiper, J. B. Claridge, M. J. Rosseinsky, *Science* **2010**, 329, 1053–1057.
- [21] J.-N. Rebilly, J. Bacsá, M. J. Rosseinsky, *Chemistry – An Asian Journal* **2009**, 4, 892–903.

- [22] Y. Su, K. Otake, J.-J. Zheng, S. Horike, S. Kitagawa, C. Gu, *Nature* **2022**, *611*, 289–294.
- [23] K.-J. Chen, D. G. Madden, S. Mukherjee, T. Pham, K. A. Forrest, A. Kumar, B. Space, J. Kong, Q.-Y. Zhang, M. J. Zaworotko, *Science* **2019**, *366*, 241.
- [24] J. Y. Kim, L. Zhang, R. Balderas-Xicohténcatl, J. Park, M. Hirscher, H. R. Moon, H. Oh, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 17743–17746.
- [25] J. Y. Kim, J. Park, J. Ha, M. Jung, D. Wallacher, A. Franz, R. Balderas-Xicohténcatl, M. Hirscher, S. G. Kang, J. T. Park, I. H. Oh, H. R. Moon, H. Oh, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 13278–13282.
- [26] K. Roztocki, S. Sobczak, A. Smaruj, A. Walczak, M. Gołdyn, V. Bon, S. Kaskel, A. R. Stefankiewicz, *J. Mater. Chem. A* **2023**, *11*, 18646–18650.
- [27] J. A. Mason, J. Oktawiec, M. K. Taylor, M. R. Hudson, J. Rodriguez, J. E. Bachman, M. I. Gonzalez, A. Cervellino, A. Guagliardi, C. M. Brown, P. L. Llewellyn, N. Masciocchi, J. R. Long, *Nature* **2015**, *527*, 357.
- [28] H. Deng, C. J. Doonan, H. Furukawa, R. B. Ferreira, J. Towne, C. B. Knobler, B. Wang, O. M. Yaghi, *Science* **2010**, *327*, 846.
- [29] H. Furukawa, U. Müller, O. M. Yaghi, *Angewandte Chemie International Edition* **n.d.**, *54*, 3417–3430.
- [30] T. M. Osborn Popp, O. M. Yaghi, *Acc. Chem. Res.* **2017**, *50*, 532–534.
- [31] Z. Ji, T. Li, O. M. Yaghi, *Science* **2020**, *369*, 674.
- [32] A. Halder, R. A. Klein, S. Shulda, G. A. McCarver, P. A. Parilla, H. Furukawa, C. M. Brown, C. M. McGuirk, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 8033–8042.
- [33] M. Mon, R. Bruno, E. Tiburcio, M. Viciano-Chumillas, L. H. G. Kalinke, J. Ferrando-Soria, D. Armentano, E. Pardo, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 13601–13609.
- [34] X. Kong, H. Deng, F. Yan, J. Kim, J. A. Swisher, B. Smit, O. M. Yaghi, J. A. Reimer, *Science* **2013**, *341*, 882.
- [35] J. A. Boissonnault, A. G. Wong-Foy, A. J. Matzger, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 14841–14844.
- [36] T.-Y. Luo, C. Liu, X. Y. Gan, P. F. Muldoon, N. A. Diemler, J. E. Millstone, N. L. Rosi, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2161–2168.
- [37] K. Roztocki, M. K. Dudek, M. Szufla, F. Formalik, V. Bon, A. Krawczuk, P. Paluch, S. Kaskel, D. Matoga, *Chem. Mater.* **2024**, DOI 10.1021/acs.chemmater.4c00406.
- [38] K. Roztocki, F. Formalik, A. Krawczuk, I. Senkovska, B. Kuchta, S. Kaskel, D. Matoga, *Angewandte Chemie International Edition* **2020**, *59*, 4491–4497.
- [39] K. Roztocki, M. Rauche, V. Bon, S. Kaskel, E. Brunner, D. Matoga, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2021**, *13*, 28503–28513.
- [40] K. Roztocki, V. Bon, I. Senkovska, D. Matoga, S. Kaskel, *Chemistry – A European Journal* **2022**, *28*, e202202255.
- [41] K. Roztocki, F. Formalik, V. Bon, A. Krawczuk, P. Goszczycki, B. Kuchta, S. Kaskel, D. Matoga, *Chem. Mater.* **2022**, *34*, 3430–3439.
- [42] S. K. Sobczak, B. Mazur, M. Malinska, F. Formalik, V. Bon, A. Khadiev, S. Kaskel, B. Kuchta, A. M. Janiak, K. Roztocki, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, DOI 10.1021/jacs.5c02552.
- [43] K. Roztocki, W. Gromelska, F. Formalik, A. Giordana, L. Andreo, G. Mahmoudi, V. Bon, S. Kaskel, L. J. Barbour, A. Janiak, E. Priola, *ACS Materials Lett.* **2023**, *5*, 1256–1260.
- [44] G. Shimizu, R. Vaidhyanathan, S. Iremonger, K. Deakin, J.-B. Lin, K. W. Dawson, *Metal Organic Framework, Production and Use Thereof*, **2014**.
- [45] J.-B. Lin, T. T. T. Nguyen, R. Vaidhyanathan, J. Burner, J. M. Taylor, H. Durekova, F. Akhtar, R. K. Mah, O. Ghaffari-Nik, S. Marx, N. Fylstra, S. S. Iremonger, K. W. Dawson, P. Sarkar, P. Hovington, A. Rajendran, T. K. Woo, G. K. H. Shimizu, *Science* **2021**, *374*, 1464–1469.
- [46] C.-H. Ho, F. Paesani, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2023**, *15*, 48287–48295.

-
- [47] T. T. T. Nguyen, G. K. H. Shimizu, A. Rajendran, *Chemical Engineering Journal* **2023**, 452, 139550.
- [48] R. Oktavian, R. Goeminne, L. T. Glasby, P. Song, R. Huynh, O. T. Qazvini, O. Ghaffari-Nik, N. Masoumifard, J. L. Cordiner, P. Hovington, V. Van Speybroeck, P. Z. Moghadam, *Nat Commun* **2024**, 15, 3898.
- [49] J. Drwęska, F. Formalik, K. Roztocki, R. Q. Snurr, L. J. Barbour, A. M. Janiak, *Inorg. Chem.* **2024**, 63, 19277–19286.