

Wydział III Nauk Matematycznych, Fizycznych i Chemicznych PAN przyznał następujące nagrody:

**NAGRODA NAUKOWA IM. MARII SKŁODOWSKIEJ – CURIE
ZA ROK 2008
W DZIEDZINIE CHEMII
ZOSTAŁA PRYZNANA:**

prof. dr hab. Januszowi LEWIŃSKIEMU, profesorowi w Instytucie Chemii Fizycznej PAN za cykl prac dotyczących aktywacji tlenu molekularnego przez związki alkilocynkowe, samoorganizację kompleksów metaloorganicznych oraz modelowanie centrów aktywnych w polimeryzacji monomerów heterocyklicznych.

Przedstawione do Nagrody osiągnięcia naukowe prof. dr hab. inż. Janusza Lewińskiego składają się z cyklu 15 publikacji oraz 2 zgłoszeń patentowych dotyczących chemii metaloorganicznych związków grupy II i III ze szczególnym uwzględnieniem reakcji z tlenem molekularnym. Reakcje związków alkilowych metali grup głównych z O₂ są przedmiotem badań od ponad 150 lat i nieustannie wzbudzają ogromne kontrowersje odnośnie ich mechanizmu oraz składu i budowy powstających produktów. Prace laureata stanowią spektakularny przełom w tych badaniach, a otrzymane wyniki stawiają go w roli światowego lidera w tym obszarze chemii.

Dzięki wypracowanej przez zespół laureata nowej strategii badawczej, po raz pierwszy m. in. przeprowadzono reakcje utleniania kompleksów alkilocynkowych w sposób wysoce selektywny oraz wyizolowano i określono budowę szerokiej grupy oryginalnych produktów, w tym pierwszych związków alkilonadtlenkowych cynku. Odkryto też, że ugrupowanie nadtlenkowe ZnOOR wykazuje dużą tendencję do ulegania rozpadowi poprzez hemolizę wiązania O-O, co dotychczas w literaturze nie było praktycznie rozważane dla alkilonadtlenków cynku i metali grup głównych. W efekcie uzyskane wyniki doprowadziły do zaproponowania nowego mechanizmu insercji O₂ w wiązanie M-C, który jest całkowicie odmienny od dotychczas powszechnie akceptowanego, podręcznikowego mechanizmu łańcuchowo-rodnikowego. Badania te mają również duży potencjał praktyczny, czego przykładem są opracowane nowe metody wytwarzania oksocynkowych klastrów, kropek kwantowych i innych nanocząsteczkowych form tlenku cynku stabilizowanych ligandami wielofunkcyjnymi lub otoczką polimerową^{*)}. Te ostatnie

osiągnięcia w obszarze nanotechnologii nie byłyby możliwe bez intensywnie prowadzonych przez laureata prac związanych z racjonalnym projektowaniem układów katalitycznych w polimeryzacji monomerów heterocyklicznych.

Inne znaczące dokonania laureata dotyczą badania procesów samoorganizacji kompleksów metaloorganicznych, do których w szczególności należy otrzymanie pierwszego metaloorganicznego polimeru koordynacyjnego o dotychczas niespotykanej topologii tkaniny oraz nowej grupy polimerów koordynacyjnych zawierających jednostki alumoksanowe AlOAl. Te innowacyjne badania otwierają nowe obszary w bardzo dynamicznie rozwijającej się chemii materiałów funkcjonalnych.

**) - nanostrukturalne formy tlenku cynku budzą szerokie zainteresowanie ze względu na ich potencjalne możliwości wykorzystania w biochemii i medycynie oraz do wytwarzania oryginalnych urządzeń elektronicznych - poza unikalną charakterystyką fizykochemiczną, ogromną zaletą nanocząstek ZnO jest ich biokompatybilność i przyjazność dla środowiska.*

NAGRODY NAUKOWE WYDZIAŁU III ZA ROK 2008 OTRZYMALI:

w dziedzinie chemii - Nagroda Naukowa im. Włodzimierza Kołosa

dr hab. Wojciech DZWOLAK, adiunkt na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego
za prace dotyczące termodynamiki i aspektów strukturalnych agregacji białek w postaci włókien amyloidowych, ze szczególnym uwzględnieniem zjawiska chiralnej bifurkacji.

W wyniku samorzutnego sklejanie się nieprawidłowo zwiniętych cząsteczek białka mogą powstawać nanowłókna bogate w struktury beta-kartki – tzw. amyloidy. Procesy formowania się amyloidów są częścią molekularnych scenariuszy *chorób konformacyjnych*, takich jak choroba Alzheimera, Parkinsona, czy Creutzfeldta-Jakoba (choroba prionowa). Mimo olbrzymiego znaczenia biomedycznego, wciąż niejasne pozostają fizykochemiczne mechanizmy tworzenia się agregatów białek, jak i molekularne podłoże ich neurotoksyczności, co utrudnia opracowanie skutecznych strategii terapeutycznych tych chorób. W swoich pracach Wojciech Dzwolak

zainteresował się termodynamicznymi aspektami niejednoznaczności konformacyjnej amyloidów objawiającej *in vivo* w postaci tzw. „szczepów prionowych” (*prion strains*). W tym kontekście istotnym wynikiem badawczym jest odkrycie zjawiska *chiralnej bifurkacji* w trakcie agregacji insuliny polegającego na losowo determinowanym formowaniu się jednego z dwóch wariantów konformacyjnych amyloidu różniących się chiralnością ich superstruktur. Tak rozumiana chiralna bifurkacja jest nowym zjawiskiem w dynamice przemian strukturalnych biopolimerów nie mającym precedensu wśród białek. Zjawisko to jest również przejawem nieznanego dotychczas aspektu hierarchicznej budowy białek: chiralności zagregowanych superstruktur *wyemancypowanej* spod deterministycznej kontroli składowych lewoskrętnych aminokwasów. Ponieważ zmiana chiralności (makro)molekuł prowadzi do dramatycznych zmian w ich aktywności biologicznej, obserwacja chiralnej bifurkacji w nieprawidłowo zwiniętych białkach może przybliżyć nam zrozumienia powodów, dla których tylko pewne formy agregatów tego samego białka są neurotoksyczne.

w dziedzinie fizyki - Nagroda Naukowa im. Stefana Pieńkowskiego

**dr Przemysław PIEKARZ, adiunkt w Zakładzie Komputerowych Badań Materiałów
Instytutu Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN**

*za wyjaśnienie mechanizmu i opracowanie teorii przejścia Verweya w magnetycie
przedstawione w pracy: „Mechanism of the Verwey Transition in Magnetite”*

Nagroda Naukowa im. Stefana Pieńkowskiego za rok 2008 przyznana została za wyjaśnienie mechanizmu i opracowanie teorii przejścia Verweya w magnetycie. Magnetyt jest najwcześniej odkrytym materiałem o silnych własnościach magnetycznych. Najciekawszym zjawiskiem występującym w tym materiale jest przejście fazowe Verweya, w którym przewodnictwo elektryczne zmienia się w sposób nieciągły o dwa rzędy wielkości. Przejściu temu towarzyszy zmiana struktury krystalicznej z symetrii kubicznej do jednoskośnej. Nagrodzona praca przedstawia szczegółową analizę przejścia strukturalnego w oparciu o teorię grup, która pozwoliła wyznaczyć dwa parametry porządku Δ_5 i X_3 . Wynik ten pokazuje, że symetria kryształu obniżana jest przez dwa fonony, które powodują deformację sieci obserwowaną w fazie niskotemperaturowej. Zasadnicza część badań polegała na wykonaniu obliczeń *ab initio*, których

celem było wyznaczenie struktury elektronowej i widma drgań atomowych, oraz zbadanie roli sprzężenia elektron-fonon w przejściu Verweya. W obliczeniach tych uwzględnione zostały lokalne oddziaływania elektronowe w stanach 3d na atomach żelaza. Najważniejszym wynikiem tych rachunków było odkrycie, że fonon o symetrii X_3 silnie oddziałuje z elektronami i generuje przejście metal-izolator. Ten wynik wyjaśnia zmianę własności transportowych magnetytu w niskich temperaturach i skok w przewodnictwie elektrycznym obserwowany w przejściu Verweya. Tak silne oddziaływanie nośników ładunku z siecią krystaliczną możliwe jest tylko w obecności korelacji elektronowych, które powodują polaryzację orbitali 3d na żelazie i niewielkie uporządkowanie ładunkowe w niskich temperaturach.

w dziedzinie matematyki - Nagroda Naukowa im. Wacława Sierpińskiego

dr hab. Grzegorz KARCH, profesor w Uniwersytecie Wrocławskim

za cykl prac dotyczących zagadnień asymptotyki w czasie i przestrzeni nieliniowych równań typu ewolucyjnego.

Rozwiązaniem automorficznym (tzw. *selfsimilar solution*) $u(x,t)$ równania różniczkowego cząstkowego typu ewolucyjnego nazywamy taką funkcję, której znajomość w ustalonej chwili czasu t_0 (np. $t_0 = 1$) jest wystarczająca do wyznaczenia jej wartości dla wszystkich $t > 0$ przez zastosowanie pewnej *transformacji automorficznej*. Jednym z najbardziej znanych rozwiązań automorficznych równania przewodnictwa ciepła (lub równania dyfuzji)

$$u_t = \Delta u, \quad x \in \mathbb{R}^n, t > 0$$

jest tzw. jądro Gaussa-Weierstrassa $G(x,t) = (4\pi t)^{-n/2} \exp(-|x|^2/(4t))$. Funkcja ta ma następującą własność skalowania: dla każdego $\lambda > 0$ oraz dla wszystkich $(x,t) \in \mathbb{R}^n \times (0,\infty)$ prawdziwa jest tożsamość $G(x,t) = \lambda^n G(\lambda x, \lambda^2 t)$. Zauważmy, że podstawiając w tym wzorze $\lambda = 1/\sqrt{t}$ otrzymujemy $G(x,t) = t^{-n/2} G(x/\sqrt{t}, 1)$. Po prawej stronie tej równości widoczna jest jawna postać transformacji automorficznej (zawierająca podstawienie Boltzmanna x/\sqrt{t}), o której mowa w pierwszym zdaniu tego streszczenia.

Rozwiązania automorficzne od dawna odgrywają ważną rolę w badaniu własności rozwiązań równań różniczkowych cząstkowych. W przypadku równania dyfuzji łatwo udowodnić, że w rozwinięciu asymptotycznym gdy $t \rightarrow \infty$ dużej klasy rozwiązań pojawia się jądro Gaussa-Weierstrassa. Wynik ten może być interpretowany jako Centralne Twierdzenie Graniczne dla równania dyfuzji, ponieważ funkcja $G(x,t)$ jest odpowiednio przeskalowaną gęstością rozkładu normalnego.

W swoich badaniach różnego typu nieliniowych równań różniczkowych cząstkowych staram się znaleźć uniwersalne prawo (czyli rozwiązanie automorficzne), które opisuje zachowanie się (tzn. występuje w pierwszym przybliżeniu rozwinięcia asymptotycznego) typowego rozwiązania. Czasami rozważane równania opisują ewolucję w czasie gęstości pewnych rozkładów prawdopodobieństwa – wówczas uzyskane wyniki interpretuje się jako twierdzenia graniczne.

Badane przeze mnie równania można podzielić na następujące grupy:

- prawa zachowania z dyfuzją i dyspersją opisujące kształt fal na powierzchni płytkiej wody (np. równanie Kortewega-De Vriesa-Burgersa),
- równania z hydromechaniki opisujące ruch płynu nieściśliwego (np. równania Naviera-Stokesa i równania Boussinesqa),
- układ równań chemotaksji (tzw. równania Kellera-Segela),

nielokalne równania ewolucyjne z tzw. anomalną dyfuzją Lévy'ego opisujące np. ewolucję gęstości chmury zderzających się cząstek, dla których chaotyczny ruch zadany jest pewnym procesem Lévy'ego.