

Załącznik nr 2a

Autoreferat

dr Anna Szwajca

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Wydział Chemii
Zakład Syntezy i Struktury Związków Organicznych

Poznań, grudzień 2015

Spis treści

1. Imię i Nazwisko.
2. Wykształcenie i stopnie naukowe
3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych
4. Wskazanie osiągnięcia stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego
 - 4.1 Wykaz monotematycznych artykułów naukowych stanowiących podstawę postępowania
 - 4.2 Omówienie celu naukowego oraz najważniejszych wyników i osiągnięć zawartych w w/w pracach
 - 4.3 Podsumowanie – najważniejsze osiągnięcia i elementy nowości naukowej
5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych
 - 5.1 Współautorstwo publikacji naukowych
 - 5.2 Prezentacja referatów i komunikatów naukowych na konferencjach krajowych i międzynarodowych
 - 5.3 Udział w projektach badawczych krajowych i zagranicznych
 - 5.4 Nagrody wynikające z prowadzonych działań naukowych

1. **Imię i Nazwisko – Anna Sz wajca**

2. **Wykształcenie i stopnie naukowe**

Doktor nauk chemicznych 2004 r. Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Wydział Chemii
Rozprawa doktorska pt: „Ylidy pirydyniowe-
właściwości fizykochemiczne, struktura i
reaktywność.”
Promotor: prof. dr hab. Mirosław Szafran

Magister chemii 1999 r. Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Wydział Chemii

3. **Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych**

Adiunkt od 2005 r. Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Wydział Chemii
Zakład Syntezy i Struktury Związków Organicznych
ul. Umultowska 89b
61-614 Poznań

4. **Wskazanie osiągnięcia stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego**

Osiągnięciem naukowym wynikającym z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach naukowych i tytule naukowym w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595 ze zm.) jest jednotematyczny cykl publikacji naukowych pt.:

„Procesy organizacji i wiązania cząsteczek związków organicznych w trwałe układy molekularne na podłożu stałym”

4.1 Wykaz monotematycznych artykułów naukowych stanowiących podstawę postępowania

Wszystkie z zamieszczonych poniżej prac opublikowane zostały w czasopismach znajdujących się w Journal Citation Reports. Podana w tabeli wartość wskaźnika Impact factor (IF) tych czasopism odnoszą się do roku opublikowania, a ujęty udział procentowy jest udziałem procentowym habilitantki w prezentowanych pracach. Dla publikacji z roku 2015 przyjęto IF z roku 2014.

| Nr | Publikacja | IF | Udział % |
|-----------|--|---------------|-----------|
| H1 | Schukfeh, M.I., Storm, K., Mahmoud, A., Søndergaard, R.R., Szwajca, A. , Hansen, A., Hinze, P., Weimann, T., Svensson, S.F., Bora, A., Dick, K.A., Thelander, C., Krebs, F.C., Lugli, P., Samuelson, L., Tornow, M. “Conductance enhancement of InAs/InP heterostructure nanowires by surface functionalization with oligo(phenylene vinylene)s” (2013) ACS Nano, 7 (5), pp. 4111-4118. DOI: 10.1021/nn400380g | | |
| | Mój wkład, dotyczył części pracy związanej z chemicznym przygotowaniem oraz analizą efektu naniesienia warstwy organicznej, polegał na: 1) Udziale w opracowaniu i zaplanowaniu optymalnej metody osadzenia związków OPV na powierzchni InAs 2) Zaplanowaniu badań AFM powierzchni OPV/InAs i wybór metodyki określenia grubości warstwy 3) Udziale w konsultacjach dotyczących funkcjonalizacji nanodrutów InAs/InP związkami OPV 4) Korekcje pracy przed złożeniem do druku. | 12,033 | 10 |
| H2 | Szwajca, A. , Rapp, M., Bilska, M., Krzywiecki, M., Koroniak, H. “Fluorinated saccharides on the Si(0 0 1) surface” (2013) Applied Surface Science, 274, pp. 221-230. DOI: 10.1016/j.apsusc.2013.03.020 | | |
| | Mój udział polegał na: 1) Opracowaniu koncepcji pracy i postawieniu hipotezy, zaplanowaniu badań oraz wyboru stosowanych metod: XPS, AFM, ATR-IR, CA, obliczeń semiempirycznych (PM5). 2) Przeprowadzeniu reakcji przygotowania podłoża Si(001) oraz przyłączenia związków organicznych – fluorowanych pochodnych pentafulanozy. 3) Prowadzeniu badań: AFM, CA, obliczeń semiempirycznych Interpretacji wyników uzyskanych dla stosowanych metod: AFM, ATR-IR, CA, obliczeń semiempirycznych. 4) Pisaniu pracy oraz: - zebraniu danych, sformułowanie wniosków z pracy dotyczących pomiarów: XPS, AFM, ATR-IR, CA oraz obliczeń semiempirycznych - graficznym przedstawieniu wyników stosowanych metod: AFM, | 2,538 | 60 |

| | | |
|--|-------|----|
| <p>ATR-IR, CA, modelowania molekularnego oraz schematów i tabel zawartych w pracy</p> <ul style="list-style-type: none"> - wybraniu literatury cytowanej - złożeniu pracy do druku oraz korespondencji z edytorem i recenzentami. | | |
| <p>H3 Szwajca, A., Koroniak, H. “Encapsulation of fluoroaromatics by β-cyclodextrin and their derivatives theoretical studies” (2014) Journal of Fluorine Chemistry, 167, pp. 122-127. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2014.07.016</p> | | |
| <p>Mój udział polegał na:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Opracowaniu koncepcji pracy i postawieniu hipotezy, zaplanowaniu badań oraz wyboru stosowanych metod obliczeniowych (semiempiryczne PM6) 2) Prowadzeniu obliczeń i interpretacji uzyskanych wyników 3) Pisaniu pracy oraz: <ul style="list-style-type: none"> - zebraniu danych, sformułowaniu wniosków z pracy - graficznym przedstawieniu wyników modelowania molekularnego, schematów i tabel zawartych w pracy - wybraniu literatury cytowanej - złożeniu pracy do druku oraz korespondencji z edytorem i recenzentami. | 1,948 | 90 |
| <p>H4 Walkowiak-Kulikowska, J., Szwajca, A., Boschet, F., Gouverneur, V., Ameduri, B. “Iodine transfer copolymerization of fluorinated α-methylstyrenes with styrene using 1-iodoperfluorohexane as the chain transfer agent” (2014) Macromolecules, 47 (24), pp. 8634-8644. DOI: 10.1021/ma501828w</p> | | |
| <p>Mój udział dotyczył części pracy związanej z przygotowaniem warstw polimerowych na sfunkcjonalizowanym podłożu szklanym oraz określenie stopnia ich zwilżalności i polegał na:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Opracowaniu i zaplanowaniu metody osadzenia warstw polimerowych na podłożu oraz pomiarów CA. 2) Przeprowadzeniu reakcji przygotowania podłoża szklanego, przyłączenie silanowej warstwy organicznej i osadzenie na jej powierzchni warstw polimerowych 3) Prowadzeniu badań i interpretacji wyników CA. 4) Napisaniu części pracy oraz: <ul style="list-style-type: none"> - zebraniu danych, sformułowaniu wniosków z pracy dotyczących pomiarów CA, graficzne przedstawienie wyników oraz wybór literatury cytowanej dotyczącej tego zagadnienia - korekty części pracy przed złożeniem do druku oraz częściowej korespondencji z recenzentami. | 5,800 | 20 |
| <p>H5 Szwajca, A., Krzywiecki, M., Pluskota-Karwatka, D. “Experimental and computational evidence for hydrogen bonding interaction between 2'-deoxyadenosine conjugate adduct and amino-terminated organic film on Si(001)” (2015) Thin Solid Films, 588, pp. 78-84. DOI: 10.1016/j.tsf.2015.04.041</p> | 1,759 | 85 |

Mój udział polegał na:

- 1) Opracowaniu koncepcji pracy i postawieniu hipotezy, zaplanowaniu badań oraz wyboru stosowanych metod: XPS, AFM, ATR-IR, CA, mikroskopii fluorescencyjnej oraz obliczeń semiempirycznych (PM5)
- 2) Przeprowadzeniu reakcji przygotowania podłoża Si(001), przyłączenia silanowego linkera oraz osadzenie skoniugowanego adduktu 2' deoksyrybozy
- 3) Prowadzeniu badań: CA, obliczeń semiempirycznych, obrazowania mikroskopem fluorescencyjnym. Interpretacji wyników uzyskanych dla stosowanych metod: AFM, ATR-IR, CA, obliczeń semiempirycznych
- 4) Pisaniu pracy oraz:
 - zebraniu danych, sformułowaniu wniosków z pracy dotyczących pomiarów: XPS, AFM, ATR-IR, CA oraz obliczeń semiempirycznych
 - graficznym przedstawieniu wyników stosowanych metod: AFM, ATR-IR, CA, obrazu spod mikroskopu fluorescencyjnego, modelowania molekularnego oraz schematów i tabel zawartych w pracy
 - wybraniu literatury cytowanej
 - złożeniu pracy do druku oraz korespondencji z edytorem i recenzentami

H6 Szwajca, A., Wei, J., Schukfeh, M.I., Tornow, M.
“Self-assembled monolayers of alkyl-thiols on InAs: A Kelvin probe force microscopy study”
(2015) Surface Science, 633, pp. 53-59.
DOI: 10.1016/j.susc.2014.11.023

Mój udział polegał na:

- 1) Częściowym opracowaniu koncepcji pracy i postawieniu hipotezy, zaplanowaniu badań oraz wyboru stosowanych metod: AFM, częściowo KPFM, elipsometrii, CA, SEM oraz obliczenia semiempiryczne (PM5).
- 2) Przeprowadzeniu reakcji przygotowania podłoża InAs(100) oraz przyłączenia do niej serii wybranych alkilowych tioli
- 3) Prowadzeniu badań: elipsometrycznych, CA, obliczeń semiempirycznych PM5, obrazowania SEM, obrazowania mikroskopem AFM, oszacowania grubości warstwy na podstawie techniki AFM. Interpretacji wyników uzyskanych dla stosowanych metod: AFM, elipsometrii, CA, obliczeń semiempirycznych oraz obliczeń matematycznych opisanych w pracy.
- 4) Pisaniu pracy oraz:
 - zebraniu danych, sformułowanie wniosków z pracy dotyczących pomiarów: AFM, elipsometrii, CA, obliczeń semiempirycznych i matematycznych.
 - graficznym przedstawieniu wyników stosowanych metod: AFM, CA, oraz schematów i tabel zawartych w pracy
 - wybraniu literatury cytowanej
 - złożeniu pracy do druku oraz korespondencji z edytorem i recenzentami

1,925 70

| | | |
|---|---------------|--------------|
| <p>H7 Szwajca, A., Krzywiecki, M., Koroniak, H. Self-assembled monolayers of partially fluorinated alcohols on Si(001): XPS and UV-photoemission study (2015) Journal of Fluorine Chemistry, 180, pp. 248-256. DOI: 10.1016/j.jfluchem.2015.10.009</p> <hr/> <p>Mój udział polegał na:</p> <p>1) Opracowaniu koncepcji pracy i postawieniu hipotezy, zaplanowaniu badań oraz wyboru stosowanych metod: XPS, UPS oraz obliczeń semiempirycznych (PM6) oraz DFT.</p> <p>2) Przeprowadzeniu reakcji przygotowania podłoża Si(001) oraz przyłączenia serii alkoholi polifluorowanych w dichlorometanie oraz acetonitrylu/wodzie z dodatkiem β-cyklodekstryny (indukowanych promieniami UV (254nm)</p> <p>3) Prowadzeniu badań: XPS, UPS, obliczeń semiempirycznych i DFT. Interpretacji wyników uzyskanych dla stosowanych metod: XPS, UPS, obliczeń semiempirycznych i DFT.</p> <p>4) Pisaniu pracy oraz:</p> <ul style="list-style-type: none"> - zebraniu danych, sformułowaniu wniosków z pracy dotyczących pomiarów: XPS, częściowo UPS, obliczeń semiempirycznych i DFT oraz obliczeń matematycznych opisanych w pracy - graficznym przedstawieniu wyników stosowanych metod: XPS, UPS, modelowania molekularnego, orbitali molekularnych oraz schematów i tabel zawartych w pracy - wybraniu literatury cytowanej - złożeniu pracy do druku oraz korespondencji z edytorem i recenzentami | 1,948 | 85 |
| <p>H8 Szwajca, A., Koroniak H. Fluorinated SAMs on Si(100) surface: surface electronic properties and structural aspects (2015) Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements DOI: 10.1080/10426507.2015.1100190</p> <hr/> <p>Mój udział polegał na:</p> <p>1) Opracowaniu koncepcji pracy przeglądowej</p> <p>2) Pisaniu pracy oraz:</p> <ul style="list-style-type: none"> - zebraniu i zestawieniu danych, opracowaniu wniosków - graficznym przedstawieniu wyników - wybraniu literatury cytowanej - złożeniu pracy do druku oraz korespondencji z edytorem i recenzentami. | 0,561 | 90 |
| <p>Sumaryczny IF</p> <p>Średni udział % habilitanta</p> | 28,512 | 63,75 |

4.2 Omówienie celu naukowego oraz najważniejszych wyników i osiągnięć zawartych w w/w pracach

Wstęp

Najnowszym osiągnięciem współczesnych procesów technologicznych są produkty rozmiarów rzędu setnych części mikrona. Trend miniaturyzacji obecny w najważniejszych dziedzinach życia jest na tyle powszechny, że pomimo wielu obaw, co do skutków nieograniczonej penetracji nanocząstek zwłaszcza w organizmach żywych, stale się rozwija i podnosi w sposób widoczny jakość naszego życia. Zastąpienie całego urządzenia elektronicznego, np. tranzystora – miniaturowym układem scalonym z elementów jednego materiału – krzemu, skutkuje zmniejszeniem rozmiarów i zwiększeniem szybkości jego pracy. Wprowadzenie podobnych zmian w urządzeniach optycznych i mechanicznych przekłada się w sposób bezpośredni na rozwój laparoskopowych narzędzi diagnostycznych i operacyjnych stosowanych np. w medycynie zmniejszając tym samym inwazyjność obu zabiegów. Dzięki rozwojowi technologii i korzyściom płynącym z modernizacji, często wielofunkcyjnych, urządzeń poprzez zmniejszanie ich obecnych rozmiarów, przyjęte dotychczas granice miniaturyzacji stale się poszerzają. Wiele dziedzin nauki bazując na dotychczasowych odkryciach oraz na stale zwiększających się możliwościach aparatury badawczej, jako kolejny krok w swoim rozwoju z powodzeniem wprowadza zakrojone na szeroką skalę innowacje. Podejmowane w tym duchu technologiczne wyzwania z zakresu: elektroniki, mechaniki, optyki czy medycyny opierają się, w dużej mierze, na interdyscyplinarności. Połączenie wysiłku naukowców podstawowych dziedzin nauki stanowi duże wyzwanie finansowe i organizacyjne, ale w efekcie końcowym przynosi ogromne zyski. Badania podstawowe z dziedzin takich jak chemia, fizyka czy biologia prowadzone na układach modelowych stanowią podstawę do projektowania oraz kontroli procesów i zjawisk w nanoskali jak i przyczyniają się do ciągłego ulepszania aparatury badawczej. Koncepcje nowych nanomateriałów jak i nanomaszyn wywodzą się często z obserwacji żywych układów biologicznych wykorzystujących proste zależności bio- lub fizykochemiczne. Samoorganizujące się warstwy (SAM, Self Assembled Monolayers) należą do najprostszych nanostruktur wykorzystywanych w badaniach podstawowych [1]. Warstwy cząsteczek chemicznych na powierzchniach stałych powstają na skutek ich spontanicznej adsorpcji z roztworu. Siła oddziaływań pomiędzy atomami w takich układach może być sklasyfikowana, jako fizysorpcja, słaba chemisorpcja lub wiązanie chemiczne. Wiązania tworzą się dzięki powinowactwu odpowiedniej grupy funkcyjnej cząsteczki organicznej do wybranego podłoża. Chemicznej modyfikacji ulega jedynie wierzchnia warstwa powierzchni stałej lub terminalne grupy funkcyjne cząsteczek warstwy osadzonej w postaci filmu. Są to procesy bardzo ciekawe, ponieważ na powierzchni występują takie zjawiska, jakich nie obserwuje się w masie. Znajomość mechanizmów reakcji powstawania takiego układu, czyli tworzenia i zrywania wiązań pomiędzy jego częściami składowymi, stanowi podstawę wiedzy o takich procesach.

Cel pracy

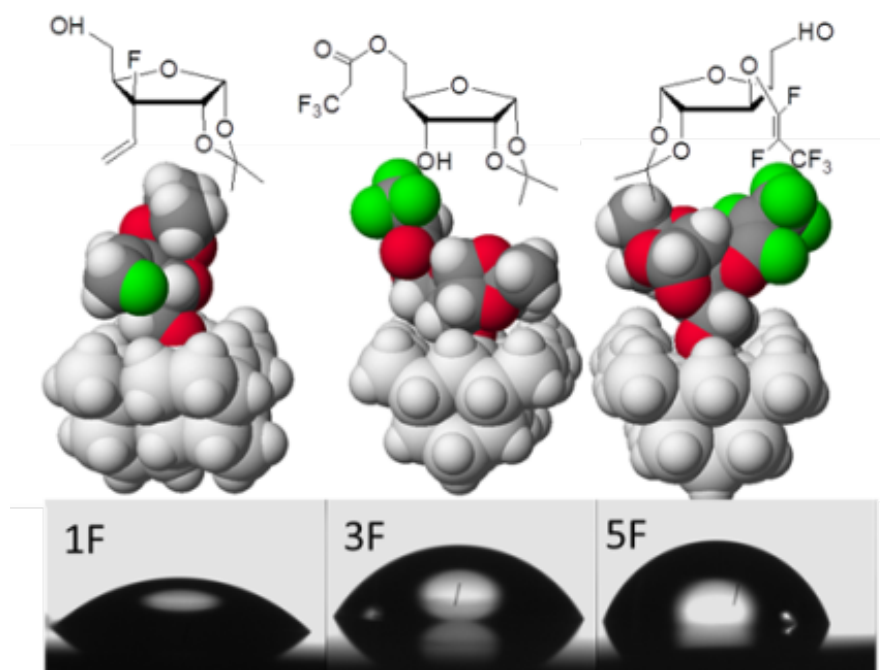
Celem prezentowanej pracy było zbadanie i przedstawienie procesów fizykochemicznych zachodzących w nanoskali w aspekcie czysto chemicznym oraz wykorzystanie zdobytej wiedzy w projektowaniu i tworzeniu materiałów o nowych

właściwościach. Jednym z elementów wiążących procesy nanotechnologiczne z dziedziny biologii, fizyki i chemii są niewątpliwie reakcje chemiczne, dzięki którym możliwy jest opis zarówno obserwowanych zjawisk jak i zmian w obrębie dynamicznych i statycznych układów w nanoskali. Wykorzystanie reakcji chemicznych w procesach nanotechnologicznych stwarza wiele możliwości realnego zastosowania tych procesów z uwagi na różnorodność i dużą selektywność samych reakcji. W dążeniu do celu aplikacyjnego wykorzystania metod chemicznych duże znaczenie odgrywają szczegółowe prace nad powstawaniem i budową dwuwymiarowych układów molekularnych. Badania takie pozwalają na precyzyjne zaplanowanie monitoringu ich tworzenia, a w przyszłości na uruchomienie procesów naprawczych. Wybrany przeze mnie układ stanowią uporządkowane powierzchnie stałe poddawane kontrolowanemu działaniu związków organicznych. Analizowany obszar, to miejsce, w którym dochodzi do reakcji pomiędzy zorganizowanymi przestrzennie atomami ostatniej, wierzchniej warstwy ciała stałego lub pokrywającej go warstwy a konkretnymi atomami cząsteczek zaadsorbowanych z roztworu. Zaplanowane i przeprowadzone przeze mnie obserwacje procesów tworzenia się takich układów z udziałem związków mono- lub wielofunkcyjnych z selektywnie blokowanymi grupami miały na celu wyjaśnienie wpływu reaktywności grup funkcyjnych oraz warunków prowadzonej reakcji powierzchniowej na jej przebieg. Odpowiedni dobór metod pomiarowych badanego układu umożliwił mi obrazowanie z rozdzielczością atomową badanej powierzchni i jej ukształtowania, topografii wraz z elementami w skali setnych części mikrometra, stopnia pokrycia powierzchni oraz ilościowe i jakościowe wyznaczenie składu powstałej warstwy. Stosowane przeze mnie techniki badania powierzchni ciał stałych, to przede wszystkim: mikroskopia sił atomowych (AFM) i skaningowa mikroskopia tunelowa oraz Kelwinowska mikroskopia sił atomowych (STM, KPFM), spektroskopia fotoelektronowa i promieniowania rentgenowskiego (UPS, XPS) oraz skaningowa mikroskopia elektronowa (SEM). Dodatkowo efekty chemicznej modyfikacji wierzchniej warstwy materiałów potwierdzałam analizując ich stan przy wykorzystaniu: spektroskopii w podczerwieni (ATR IR), elipsometrii, mikroskopii fluorescencyjnej oraz wyznaczając zmianę ich kąta zwilżalności (CA). Część badań dodatkowo wspierałam modelowaniem molekularnym na podstawie obliczeń kwantowo chemicznych wykorzystujących metody semiempiryczne (PM5, PM6, AM1d) jak i DFT.

Otrzymywanie i analiza nano- i mikro- warstw organicznych na podłożach półprzewodników

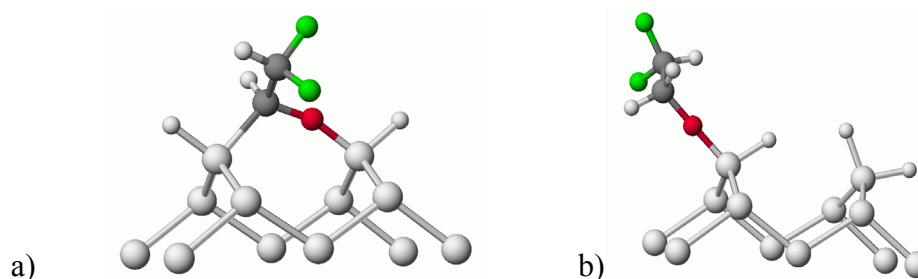
Przedstawiony powyżej cykl prac **H1-H8** zawiera opublikowane wyniki prowadzonych przeze mnie badań, pod wspólnym tytułem: „Procesy organizacji i wiązania cząsteczek związków organicznych w trwałe układy molekularne na podłożu stałym”. Przeprowadzone badania dotyczyły układów w skali „nano” w aspekcie czysto chemicznym. Opracowane przeze mnie optymalne i powtarzalne metody osadzania związków organicznych na powierzchniach nieorganicznych półprzewodników pierwiastkowych Si(001) (**H7**) lub binarnych InAs(001) (**H6**) nierozzerwalnie wiązały się z procesem przygotowania samego podłoża nieorganicznego. Stopień czystości (adsorbowane zanieczyszczenia pochodzenia organicznego oraz tlenki powierzchni nieorganicznych) jak i nierówności funkcjonalizowanej powierzchni wpływają bezpośrednio na homogeniczność tworzonej warstwy organicznej. Proces trawienia rodzimych tlenków wybranych powierzchni odbywa się przy odpowiednim doborze reagentów (im bardziej złożona powierzchnia tym bogatszy skład) zdolnych „zetrzeć” je chemicznie z powierzchni pozostawiając wierzchnią warstwę atomów półprzewodnika. W celu osadzenia związków organicznych na odpowiednio przygotowanych powierzchniach stałych, stosowałam selektywne reakcje zarówno fotochemiczne (dla grup –OH) (**H2, H7**) jak i termiczne (grupy –SH) (**H6, H1**). Wszystkie reakcje, zarówno

przygotowania podłoża jak i jego pasywacji, prowadzone były w środowisku gazu obojętnego, w komorze (glovebox) z kontrolowanym poziomem wilgoci, co uniemożliwiało powtórny pasywację powierzchni jej tlenkami. Chemiczne przygotowanie podłoża pod monowarstwę oraz analiza efektu jej naniesienia, oparte na właściwym doborze prowadzonych reakcji chemicznych w przypadku łańcuchowych alkoholi i tioli, w efekcie końcowym prowadzonych badań skutkowało bardzo dobrym pokryciem powierzchni. W przypadku związków alifatycznych zawierających grupę funkcyjną –SH na powierzchni InAs oraz grupę –OH na powierzchni Si, wartości upakowania osadzanych cząsteczek, wyznaczone na podstawie odpowiednio pomiarów KPFM i XPS, wynoszą około 1×10^{14} i 2×10^{14} cm^{-2} , co w świetle literatury stanowi zadawalający rezultat. W kolejnym etapie badań, do tworzenia warstw organicznych wykorzystałam związki o bardziej złożonej budowie, takie jak pochodne 1,2-O-izopropylideno-D-pentafuranozy, których pozycja C3 podstawiona jest alkilowymi podstawnikami monofluorowymi lub eterem winylowym pentafluoropropenu lub pochodne 1,2-O-izopropylideno-D-pentafuranozy, których pozycja C5 podstawiona jest estrem kwasu trifluoropropanowego (**H2**). Obserwacja procesu tworzenia się układów w nanoskali z udziałem związków wielofunkcyjnych z selektywnie blokowanymi grupami funkcyjnymi daje duże możliwości poznawcze. Wybrana przeze mnie do badań grupa związków, jakim są pochodne rybozy, posiada wiele miejsc potencjalnie reaktywnych. Reakcje z udziałem związków wielofunkcyjnych, z selektywnie blokowanymi grupami funkcyjnymi, wzbogaciły prowadzone badania o dodatkowe informacje dotyczące najkorzystniejszego miejsca przyłączenia tych związków. Informacje te pozwoliły ukierunkować dalsze badania m.in. na optymalne wykorzystanie powierzchni. Terminalne grupy funkcyjne cząsteczek, w przypadku grupy –OH przyłączone do atomów węgla C5 lub C3 łączą się z powierzchnią stałą a modyfikowany pierścień cukrowy czyni ją wrażliwą na czynniki zewnętrzne (**H2**). W podejmowanych badaniach istotnym elementem było stworzenie takich warunków, w których nanowarstwa bioorganiczna pozostanie w niezmięnionej postaci przez cały proces, a z drugiej strony będzie należycie wyeksponowana na czynniki zewnętrzne. Dodatkowa modyfikacja fluorem pierścieni rybozy wpłynęła na właściwości fizykochemiczne sfunkcjonalizowanych powierzchni krzemowych. Wprowadzenie atomu fluoru a tym bardziej grupy –CF₃ spowodowało wzrost lipofilowości powierzchni. Wartość kąta zwilżania wyznaczona dla powierzchni krzemowych sfunkcjonalizowanych pochodnymi pentafuranozowymi (Rys.1) zależała od ilości atomów fluoru znajdujących się w cząsteczce.



Rys. 1. Kąt zwilżania wyznaczony dla powierzchni krzemowych funkcjonalizowanych fluorowanymi pochodnymi pentafulanozy [H2].

W kolejnych badaniach, tym razem cząsteczek bardziej reaktywnych wykorzystałam, opracowane wcześniej i sprawdzone na związkach o prostej jak i złożonej budowie, warunki reakcji fotochemicznej grupy $-OH$ z podłożem krzemowym. Jako reagentów użyłam alkilowych alkoholi polifluorowanych, zawierających w swoim łańcuchu jedną grupę metylenową usytuowaną w sąsiedztwie grupy $-OH$ (H7). Podczas reakcji fotochemicznych (254 nm) w związkach tych, oprócz oderwania atomu wodoru grupy $-OH$ może dojść również do oderwania atomu H_{α} jedynej grupy metylenowej w tych cząsteczkach. W efekcie takiej reakcji możliwe są zatem dwa produkty – z podłożem krzemowym: $Si-OCH_2R$ lub $Si-CH(OH)R$ ($R = (CF_2)_nCHF_2$ lub $(CF_2)_nCF_3$, dla $n=2,4,7$). Przeprowadzone obliczenia kwantowo chemiczne fragmentu układu powierzchni $Si(001)$ z zaadsorbowaną cząsteczką alkoholu polifluorowanego wskazują, że najtrwalszą strukturę otrzymujemy dla połączenia $Si-OCH(Si)-R$ (Rys. 2a), które jest efektem reakcji zarówno grupy $-OH$ jak i $-CH_2-$ z podłożem.



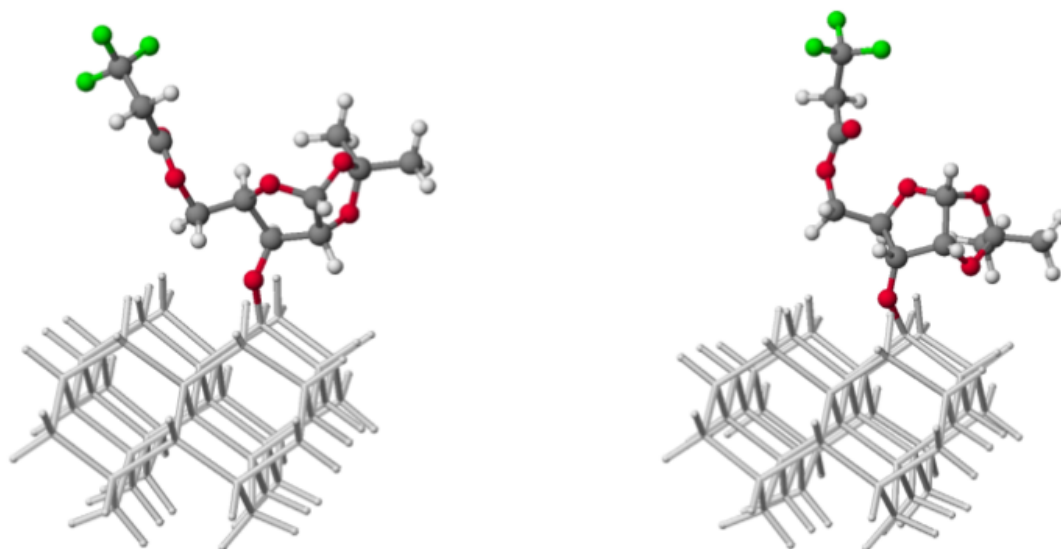
Rys. 2. Obliczone (PM6) struktury możliwych połączeń alkoholi polifluorowanych, na przykładzie CF_2HCH_2OH , z powierzchnią krzemu $Si(001)$ [H7].

Potwierdzeniem wyników omawianych obliczeń jest przeprowadzona analiza jakościowa powierzchni metodą XPS oraz przeprowadzone, na podstawie pomiarów, obliczenia stopnia pokrycia powierzchni. Porównanie wyników otrzymanych dla alkoholi polifluorowanych

wskazuje na większe upakowanie cząsteczek alkoholi z jedną grupą metylenową (RCH_2OH) pomiędzy terminalną grupą $-\text{OH}$ a łańcuchem perfluorowanym (**H7**) z uwagi na możliwość różnych sposobów przyłączenia do powierzchni (Rys. 2)

Osadzania podwójnej warstwy organicznej na powierzchniach stałych

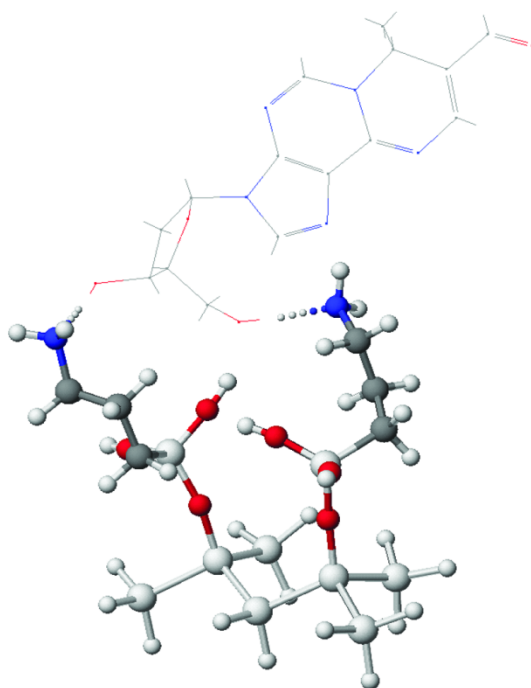
Alternatywą w stosunku do osadzania związków chemicznych na powierzchniach krystalicznych jest osadzanie ich na powierzchniach polimerowych [2]. Pierwszym etapem podjętych przeze mnie badań w tym kierunku było osadzenie związków organicznych, w tym przypadku pochodnych deoksyrybozy (**H5**), które są skoniugowanymi adduktami aldehydu malonowego i octowego, na podłożu poliwarstwy organicznej o strukturze zbliżonej do polimerowej. Związki te wykazują naturalną fluorescencję, dzięki czemu stanowiły, podczas analizy prowadzonej pod mikroskopem fluorescencyjnym, warstwę łatwo rozpoznawalną na podłożu polimerowym. Osadzanie związków silanowych na powierzchniach krzemowych z aktywowanymi grupami $-\text{OH}$, jest metodą znaną w literaturze i szeroko stosowaną [3]. Przeprowadzając kontrolowane osadzanie trimetoxy aminopropylosilanu w rozpuszczalniku aprotycznym przy wydłużonym czasie chemisorpcji, na powierzchni krzemu (001) z aktywowanymi grupami $-\text{OH}$, otrzymałam poliwarstwę organiczną z licznymi, terminalnymi grupami $-\text{NH}_2$ skierowanymi na zewnątrz powierzchni. Obliczenia kwantowo chemiczne dotyczące optymalnego ułożenia pierścienia cukrowego w procesie organizacji i osadzania na powierzchni stałej Si(001) (**H2**) (Rys. 3) pozwoliły również przewidzieć miejsce przyłączenia adduktu pochodnej 2' deoksyadenozyny do silanowej warstwy organicznej.



Rys. 3. Obliczona (PM5) struktura dwóch izomerów fluorowanej pentafuranozy na powierzchni Si(001) [**H2**].

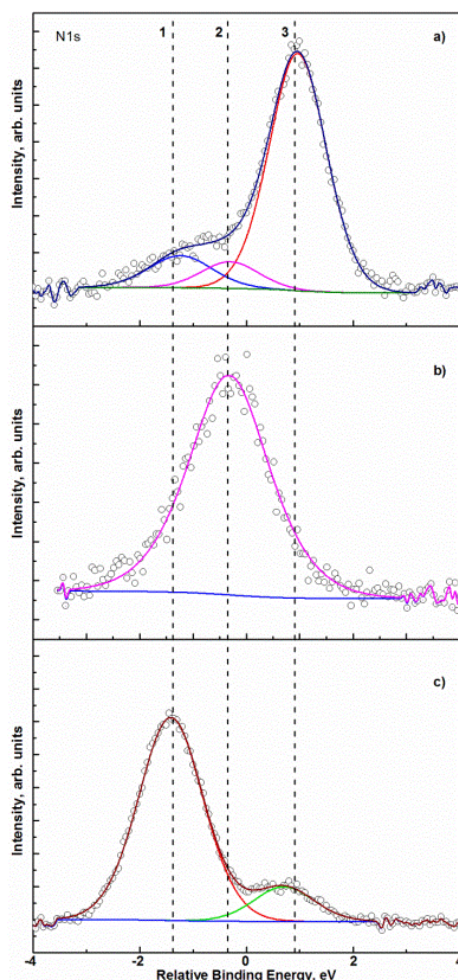
Prezentowane powyżej (Rys.3) wizualizacje dwóch struktur izomerów monosacharydu na powierzchni Si(001) przedstawiają je w najbardziej korzystnym energetycznie ułożeniu. Otrzymane wartości energii wiązania cząsteczek do powierzchni stałej umożliwiły wizualizację miejsca i sposobu przyłączenia fluorowanych pochodnych tych monosacharydów. Obliczenia wykazały, że jedynie, do co drugiego atomu krzemu powierzchni (001) przyłączy się wiązaniem Si-O cząsteczka cukru. Obliczone wartości długości wiązań, kątów oraz momenty dipolowe posłużyły w dalszej kolejności do oszacowania ułożenia cząsteczek w warstwie na powierzchni płaskiej, wyznaczenia ich kąta nachylenia oraz stopnia

upakowania na powierzchniach krystalicznego półprzewodnika. Podobnie w przypadku osadzania adduktów 2'-deoksyadenozyny na warstwie silanoorganicznej krzemu (Rys. 4), obliczenia wskazały, że przyłączenie cząsteczki skoniugowanego adduktu zachodzi jedynie przy udziale wiązania wodorowego. Wiązanie to powstaje pomiędzy grupą $-NH_2$ cząsteczki 3-aminopropylotrimetoxysilanu a grupami $-OH$ przyłączonymi do atomów węgla C3 i C6 pierścienia deoksyrybozy.



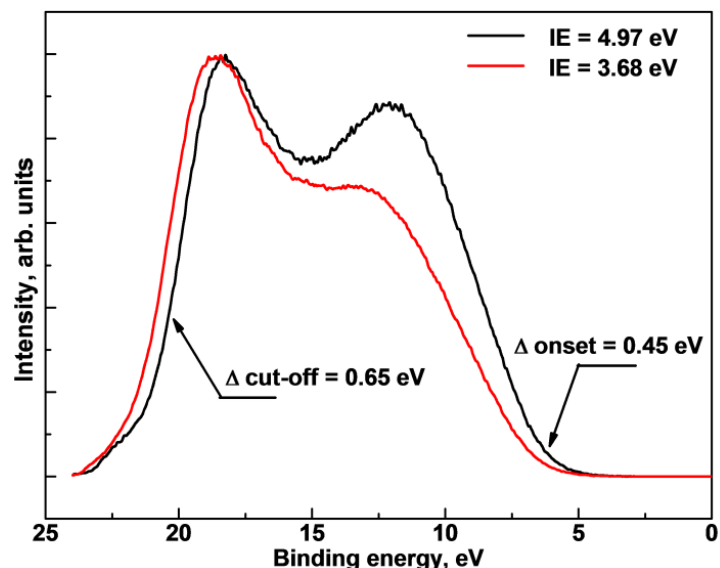
Rys. 4. Obliczona struktura adduktu 2'-deoksyadenozyny na powierzchni krzemu sfunkcjonalizowanej cząsteczkami silanoorganicznymi [H5].

Dalsze badania eksperymentalne stanowiły potwierdzenie udziału pierścienia cukrowego w procesie immobilizacji. W tym celu przeprowadziłam szczegółową analizę właściwości elektronowych otrzymanych warstw organicznych na podstawie metod fotoemisyjnych: rentgenowskiej spektroskopii fotoemisyjnej (XPS) (Rys.5) oraz spektroskopii fotoemisyjnej w ultrafiolecie (UPS) (Rys.6). Powyższe analizy potwierdziły sposób połączenia adduktu 2'-deoksyadenozyny z warstwą alkilosilanową za pomocą wiązania wodorowego.



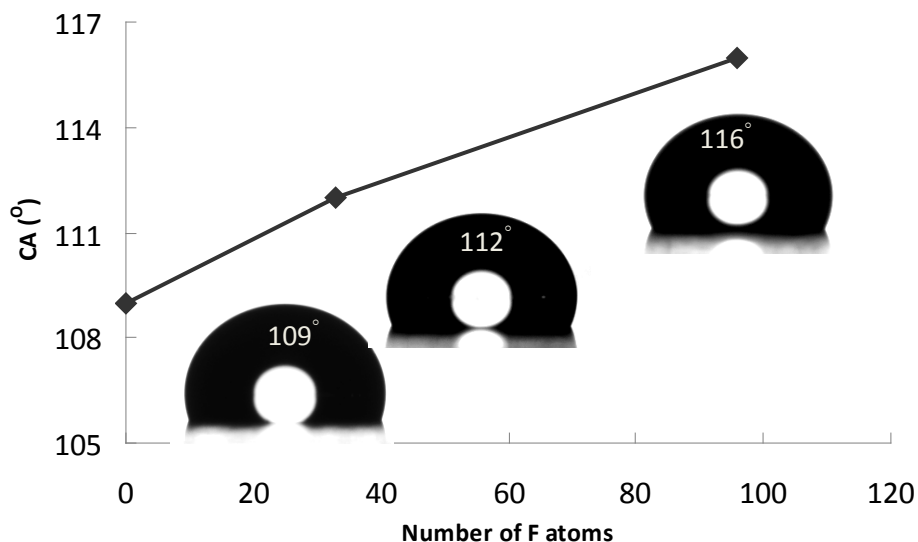
Rys. 5. Pasmo N1s (XPS) zarejestrowane dla powierzchni 3-aminopropylotrimetoxysilanu /Si(001) (a), adduktu 2'-deoxyadenozyny/ 3-aminopropylotrimetoxysilanu/ Si(001) (b) oraz 3-aminopropylotrimetoxysilanu+HCl/ Si(001) (c) [H5].

W wysokorozdzielczym widmie XPS, osadzonej pochodnej nukleozydowej na warstwie silanowej, pasmo N1s charakterystyczne dla atomu azotu, występuje przy 401,7eV co odpowiada grupie -NH_2 związanej wodorowo. Ponadto, analizując widmo UPS obserwujemy wyraźny wzrost intensywności pasma aminowego tylko w przypadku czwartorzędowej soli amonowej ($\text{-N}^+\text{H}_4$), powstałej w wyniku sprotonowania grup -NH_2 warstwy alkylsilanowej kwasem solnym. Mniejsza intensywność pasma dla tego samego zakresu, zarejestrowanego dla pochodzącego od warstwy z zaadsorbowanym adduktem 2'- deoxyadenozyny świadczy o jego obecności i przyłączeniu do warstwy alkylsilanowej.



Rys. 6. Widmo UPS zarejestrowane dla adduktu 2'-deoxyadenozyny/ 3-aminopropylotrimetoxysilanu/ Si(001) (—) oraz 3-aminopropylotrimetoxysilanu+HCl/ Si(001) (—) [H5].

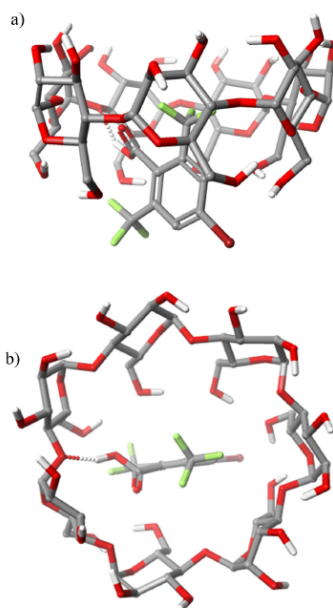
Warstwy polimerowe, jako podłoża komponentów stabilnych i tolerowanych w pełni przez tkanki organizmów ludzkich stanowią kolejne rozwiązanie w procesie tworzenia sztywnych układów molekularnych w nanoskali. Polimery fluorowanych pochodnych α -fluorometylostyrenu i α,α,α -trifluorometylostyrenu ze styrenem (H4) zmieniają stopień zwilżalności sfunkcjonalizowanej związkami silanowymi powierzchni szkła. Analizę stopnia pokrycia filmów polimerowych opierałam przede wszystkim na obserwacji zmian zwilżalności powierzchni nimi pokrytych. Pomiar kąta zwilżania powierzchni sfunkcjonalizowanej przed i po naniesieniu fluorowanej substancji polimerowej pozwolił na ilościowe określenie tych zmian (Rys.7). Obliczona wartości kątów zwilżania stanowi wartość charakterystyczną dla danego układu. Kąt zwilżania wyznaczony dla powierzchni szkła sfunkcjonalizowanego związkami alkylsilanowymi każdorazowo wynosił przed nałożeniem polimeru 120° , a po nałożeniu w zależności od użytego polimeru i ilości atomów fluoru od 109° do 116° .



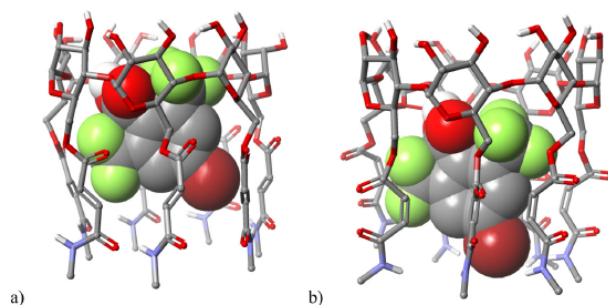
Rys. 7. Korelacja wartości kąta zwilżania wyznaczona dla powierzchni polimer/związek alkilosilanowy/szkło w zależności od ilości atomów fluoru w polimerze [H4].

Udział związków makrocyklicznych w procesie organizacji warstw organicznych

Osadzanie związków polifluorowanych, z uwagi na ich właściwości fizykochemiczne wymusza znaczne ograniczenia w doborze rozpuszczalników używanych w reakcjach osadzania. Kolejnym problemem badawczym podjętym przeze mnie w prezentowanym cyklu publikacji było wykorzystanie cyklodekstryn (CD), jako nanotransporterów związków organicznych w procesie budowania samoorganizujących się fluorowanych układów molekularnych (H3). β -cyklodekstryna jako nanotransporter dzięki swojej hydrofobowej wnęce jest w stanie przetransportować do powierzchni cząsteczki hydrofobowe, nierozpuszczalne w hydrofilowym, polarnym środowisku w którym zachodzi adsorpcja. Umożliwia to selektywną modyfikację powstającego układu powierzchniowego już podczas jego tworzenia. Układy takie powstają na skutek spontanicznej adsorpcji cząsteczek organicznych uwalnianych, w wyniku reakcji z powierzchnią, z wnętrza samoorganizujących się molekuł transportera. Przeprowadzone obliczenia i ich analiza pozwoliły przewidzieć, który z układów makrocyklicznych stanowić będzie efektywniejszy nanokontener w transporcie międzyfazowym. W pierwszym etapie na podstawie obliczeń kwantowo chemicznych przeanalizowałam układy kompleksów inkluzyjnych fluorowanych pochodnych benzenu zarówno z samą β -cyklodekstryną i jej pochodnymi, modyfikowanymi w pozycji C6 monoamidem kwasu maleinowego lub fumarowego. Modyfikacja wszystkich, drugorzędowych grup hydroksylowych w pozycji C6, poprzez dobudowanie do niej związków łańcuchowych, miała na celu zwiększenie wnętrza inkluzyjnej β -cyklodekstryny. Dodatkowo, wybrane podstawniki, dzięki swojej budowie, kształtowały w nieco odmienny sposób wnętrze nowo powstającej części. Ułożenie *cis* obu grup karbonylowych względem środkowego wiązania podwójnego skutkowało lekkim przewężeniem powstającego kanału. Wybrane przeze mnie do badań pochodne benzenu tworzą z cukrowymi związkami makrocyklicznymi kompleksy 1:1 (H3). Różnorodne podstawienie pierścienia benzenowego samymi atomami fluoru lub różnie fluorowanymi podstawnikami wpłynęły na stopień zagnieżdżenia się związków we wnęce, co znalazło odzwierciedlenie w wartościach obliczonych energii tworzenia kompleksów inkluzyjnych zarówno samej β -cyklodekstryny (Rys.8), jak i jej pochodnych modyfikowanych monoamidami kwasowymi (Rys.9).

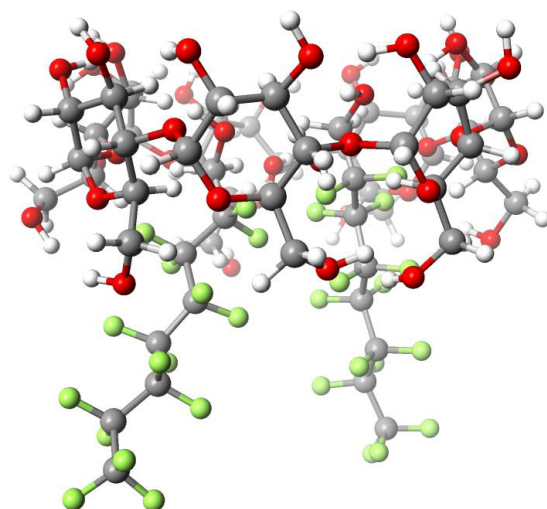


Rys. 8. Obliczona (PM6) struktura β -cyklodekstryny z 4-bromo-2,6-bis(trzyfluorometylo)kwasem benzoesowym [H3].



Rys. 9. Obliczona (PM6) struktura kompleksu β -cyklodekstryny sfunkcjonalizowanej monoamidem kwasu maleinowego z 4-bromo-2,6-bis(trzyfluorometylo)kwasem benzoesowym [H3].

Przeprowadzenie obliczeń energii tworzenia kompleksów inkluzyjnych β -cyklodekstryny ze związkami łańcuchowymi, wymagało przyjęcia innych założeń (H7). Na podstawie doniesień literaturowych wiadomo, że we wnętrzu pierścienia może zmieścić się więcej niż jeden łańcuch związku alkilowego, dlatego wnętrza oligosacharydów nie wymagają rozbudowy[4]. Bardzo często jednak, w takich przypadkach dochodzi również do inkluzji cząsteczek rozpuszczalnika. Najniższe wartości obliczonych energii otrzymałam dla β -cyklodekstryny, w której wnętrzu uwzględniłam obecność dwóch łańcuchów alkilowych alkoholi polifluorowanych oraz jednej cząsteczki rozpuszczalnika (Rys. 10).



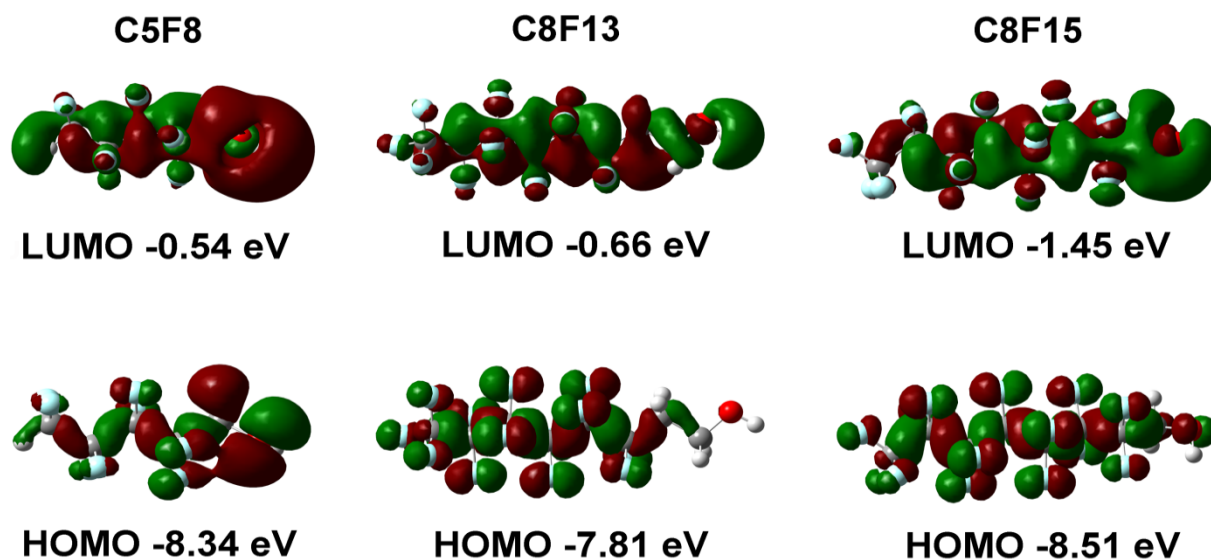
Rys. 10. Obliczona struktura kompleksu inkluzyjnego alkoholu polifluorowanego ($\text{CF}_3(\text{CF}_2)_6\text{CH}_2\text{OH}$) z β -cyklodekstryną i dwiema cząsteczkami wody [H7].

Na podstawie ustalonego stosunku cząsteczek kompleksu inkluzyjnego pomyślnie przeprowadziłam reakcję osadzania tych związków z udziałem „nanotransporterów” w acetonitrylu. Efekt osadzenia przeanalizowałam na podstawie analizy widm XPS w zakresie pasma C1s (H7).

Materiały hybrydowe na bazie nano układów

Nanoukłady prezentowane w pracach (H1, H6, H7, H8) stanowią przykłady układów modelowych nie tylko z uwagi na możliwość analizy zjawisk fizykochemicznych związanych z ich budową w nano skali, ale również z uwagi na ich nowe, stabilne właściwości chemiczne i elektryczne. Połączenie krystalicznych, w pełni scharakteryzowanych struktur półprzewodników z cząsteczkami organicznymi o różnorodnej budowie i właściwościach daje nieograniczone możliwości kreowania nowych materiałów. Współistnienie materiałów o odmiennych właściwościach możliwe jest jedynie w prezentowanych nieorganiczno/organicznych strukturach hybrydowych. Możliwość transportu elektronów z udziałem orbitali molekularnych polioliogofenyloynyli (OPV), charakteryzujących się dużą przewodnością pozwoliło wykorzystać je, do stworzenia przewodów organicznych o długości 12 nm łączących swoimi końcami powierzchnię nanodrutów InAs o łącznej długości $3\mu\text{m}$ i średnicy 45 nm ponad 5 nm segmentem InP (H1). Funkcjonalizacja powierzchni półprzewodnika binarnego InAs cząsteczkami organicznymi spowodowała wzrost jego przewodnictwa powierzchniowego, pomimo wewnętrznego segmentu InP stanowiącego barierę energetyczną układu. Szczegóły budowy oraz opis powstających wiązań nowej funkcjonalnej powierzchni dostarczają niezbędnych informacji na bazie, których powstaje kompletny opis obszaru międzyfazowego odpowiedzialnego za nowe właściwości. W prezentowanych pracach brałam pod uwagę wpływ zarówno termalnej grupy funkcyjnej cząsteczki warstwy organicznej (H7), jak i terminalnego atomu powierzchni półprzewodników (H6) tworzonych układów warstwowych. Oba elementy strukturalne stanowią ważny element warunkujący kierunek indukowanego momentu dipolowego obszaru między fazowego. Zmiana końcowej grupy łańcucha alkilowego z $-\text{CF}_2\text{H}$ na $-\text{CF}_3$ w przypadku powierzchni organicznej lub atomu wiążącego $-\text{As}$ na $-\text{In}$ powierzchni nieorganicznej binarnego półprzewodnika (InAs) skutkuje zmianą kierunku obliczonego momentu dipolowego cząsteczek. Przekłada się to bezpośrednio na wartość pracy wyjścia nowego układu hybrydowego, którego wartości różnią się od wartości wyznaczonych w tych

samych warunkach dla czystych półprzewodników [5]. Nie bez znaczenia, w przypadku analizy F-SAM, jest obecność atomów fluoru. Oprócz wpływu długości łańcucha, zaobserwowałam również znaczący wpływ ilości atomów fluoru na wartość pracy wyjścia w obrębie łańcucha alkilowego o tej samej długości (**H7**). Odmienny rozkład gęstości elektronowej wzdłuż wiązania C–C w łańcuchach polifluorowanych związków obrazują obliczone wartości orbitali HOMO/LUMO łańcuchów polifluorowanych o różnej długości (**H7, H8**) (Rys.11).



Rys. 11. Obliczone wartości orbitali HOMO/LUMO alkoholi polifluorowanych C5F8, C8F13 and C8F15[**H7**].

Orbitale HOMO dla długołańcuchowych alkoholi zlokalizowane są symetrycznie, podczas gdy, dla krótszych łańcuchów głównie na terminalnej grupie –OH. Dzięki temu przebieg korelacji oporności łańcucha polifluorowanego w stosunku do jego długości jest bardziej gwałtowny niż w przypadku układów niefluorowanych. Ponadto, dzięki obecności atomów fluoru w łańcuchach alkilowych fluorowane warstwy organiczne łatwo adsorbują na swojej powierzchni warstwę cząsteczek ftalocyanin (Pc) (**H8**) i, w wyniku przeniesienia ładunku między fazami, powstaje indukowany dipol międzyfazowy. W konsekwencji prowadzi to do trwałej zmiany ułożenia poziomu próżni w obu warstwach organicznych.

4.3 Podsumowanie

Przedstawiony cykl publikacji (**H1-H8**) zawiera wyniki badań, których celem w prezentowanej pracy było zbadanie i opisanie procesów fizykochemicznych zachodzących w nanoskali, w aspekcie czysto chemicznym, oraz wykorzystanie zdobytej wiedzy do projektowania i tworzenia materiałów o nowych właściwościach. Wybrane do badań układy warstw organicznych osadzone na powierzchniach stałych półprzewodników analizowane były z uwzględnieniem przynajmniej jednego z poniższych aspektów:

- otrzymywania i analizy nano- i mikro- warstw organicznych na podłożach półprzewodników (**H6, H2**)
- osadzania i analizy podwójnej warstwy organicznej na powierzchniach stałych (**H4, H5**)

- udziału związków makrocyklicznych w procesie organizacji warstw organicznych (**H3, H7**)
- tworzenia materiałów hybrydowych na bazie nano układów (**H1, H8, H7**)

Zgodnie z przyjętym kierunkiem badań, poniżej przedstawiam najważniejsze wyniki i osiągnięcia ze szczególnym uwzględnieniem tych, które zawierały elementy nowości naukowej:

1. Otrzymano i scharakteryzowano serię monowarstw alifatycznych tioli o różnej długości łańcucha i rodzaju grupy końcowej na powierzchni półprzewodnika InAs (100). Opracowano udoskonaloną metodę przygotowania powierzchni binarnego półprzewodnika InAs. Wykazano, za pomocą elipsometrii, pomiaru kąta zwilżania oraz obrazowania mikroskopią sił atomowych, że osie cząsteczek w utworzonych nowych homogenicznych i jednorodnych warstwach wykazywały nachylenie do powierzchni ok. 30°. Dodatkowo za pomocą pomiarów Kelwinowskiej mikroskopii sił atomowych otrzymanych powierzchni oraz obliczeniom semiempirycznym momentów dipolowych cząsteczek tioli oszacowano gęstości upakowania tych cząsteczek na powierzchni InAs (100). Uzyskane wartości mieściły się w przedziale $0,40\text{--}1,03 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, co dodatkowo świadczy o jakości otrzymanych warstw hybrydowych InAs/SAM.
2. Po raz pierwszy przeprowadzono reakcję bezpośredniego osadzania pierścieni cukrowych na powierzchni krzemu (001) (acetonitryl, 254nm). Wybrane pochodne pentafulanozowe łączyły się z powierzchnią krzemową grupami –OH przyłączonymi do atomów węgla pozycji C3 lub C5. Obliczenia semiempiryczne potwierdziły tworzenie się międzyfazowego wiązania Si–O. Otrzymane monowarstwy zostały scharakteryzowane z wykorzystaniem mikroskopii sił atomowych (AFM), spektroskopii fotoelektronowej (XPS) i spektroskopii osłabionego całkowitego odbicia (ATR) w podczerwieni. Za pomocą analizy wartości kąta zwilżania wykazano na zależność pomiędzy wartością kąta zwilżania nowych powierzchni a ilością atomów F i grup –CF₃ w cząsteczkach wybranych pochodnych pentafulanoz.
3. Opracowano prostą metodę osadzania skoniugowanych adduktów 2'-deoksyadenozyny na powierzchni aminosilanowej. Na podstawie analizy widm XPS zakresu N1s oraz O1s wykazano udział terminalnych grup –NH₂ warstwy silanowej oraz –OH pierścienia adduktu deoksyrybozy w wiązaniu wodorowym. Dodatkowo przeprowadzone obliczenia kwantowo chemiczne badanych układów pokazały udział wiązania wodorowego w procesie unieruchamiania fluorescencyjnych cząsteczek adduktów 2'-deoksyadenozyny na powierzchni Si-SAM.
4. Otrzymano jednolite warstwy kopolimerów fluorowanego α-metylostyrenu ze styrenem na sfunkcjonalizowanej, związkami silanowymi, powierzchni szkła. Na podstawie analizy kąta zwilżania otrzymanych powierzchni organicznych określono wpływ α-fluorometylostyrenu i α-trifluorometylostyrenu na właściwości hydrofobowe badanych polimerów.
5. Przeprowadzono obliczenia i porównanie ciepła kompleksowania β-CD oraz jej pochodnych (całkowicie modyfikowanych w pozycji C6 monoamidem kwasu fumarowego i maleinowego) z fluorowanymi pochodnymi aromatycznymi. Wykazano silną zależność zdolności kompleksowania układów makrocyklicznych od ich budowy oraz budowy fluorowanych pochodnych aromatycznych. Wykazano na podstawie obliczeń, że podstawniki –F oraz –CF₃ łatwo wpasowują się do hydrofobowego wnętrza zarówno β-CD jak i jej pochodnych. Pozostałe podstawniki pierścienia benzenowego związane są wodorowo z pierścieniem CD lub fragmentem grupy

estrowej jej pochodnych. Obecność tych wiązań nie wpływa jednak znacząco na stabilność rozważanych kompleksów.

6. Przeprowadzono reakcje osadzania alifatycznych alkoholi polifluorowanych o różnej długości łańcucha na hydrofobowej powierzchni Si (001). Reakcja prowadzona była w dichlorometanie oraz roztworze acetonitrylu/woda z dodatkiem β -CD oraz katalizowane światłem UV (254 nm). Powstałe w wyniku reakcji trwałe wiązania międzyfazowe scharakteryzowano przy użyciu spektroskopii fotoelektronów w zakresie promieniowania X. Obliczone wartości energii wiązania (eV) (B3LYP/6-311G(d,p)) dla obszaru C1s wybranych alifatycznych alkoholi polifluorowanych pozwoliły na prawidłowe przypisanie energii wiązania stanów elektronowych atomów węgla grup: -CFH-, -CF₂- oraz -CF₃. Ponadto na podstawie danych eksperymentalnych pracy wyjścia oraz energii jonizacji (work function WF, ionization energy I_e) oraz obliczonych (wartości energii orbital HOMO i LUMO), wykazano zależność efektów powierzchniowych od ilości atomów fluoru w cząsteczce.
7. Wykazano współdziałanie badanych układów, tj. InAs/InP oraz Si-SAM ze sprzężonym układem wiązań podwójnych cząsteczek polioliigowinyli (OPV) i ftalocyjanin (Pc), mających zastosowanie w elektronice molekularnej, co powinno znacząco przyczynić się do ich praktycznego zastosowania.

Literatura cytowana:

- [1] Love, J.C., Estroff, L.A., Kriebel, J.K., Nuzzo, R.G., Whitesides, G.M., "Self-assembled monolayers of thiolates on metals as a form of nanotechnology". (2005) *Chemical Reviews*, 105 (4), pp. 1103-1169.
- [2] Caseri, W., "Nanocomposites of polymers and metals or semiconductors: Historical background and optical properties", (2000) *Macromolecular Rapid Communications*, 21 (11), pp. 705-722.
- [3] Ciampi, S., Harper, J.B., Gooding, J.J., "Wet chemical routes to the assembly of organic monolayers on silicon surfaces via the formation of Si-C bonds: Surface preparation, passivation and functionalization", (2010) *Chemical Society Reviews*, 39 (6), pp. 2158-2183.
- [4] Del Valle, E.M.M., "Cyclodextrins and their uses: A review", (2004) *Process Biochemistry*, 39 (9), pp. 1033-1046.
- [5] Facchetti, A., Yoon, M.-H., Marks, T.J., "Gate dielectrics for organic field-effect transistors: New opportunities for organic electronics", (2005) *Advanced Materials*, 17 (14), pp. 1705-1725.

5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych

5.1 Współautorstwo publikacji naukowych

Jestem autorką lub współautorką **25** publikacji naukowych, w tym **19** publikacji w czasopismach znajdujących się w bazie *Journal Citation Reports* (JCR). Sumaryczny *impact factor* (IF) wynosi **47,193**, przed doktoratem **3,171**, po doktoracie **44,022**.

Liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science (WoS):

78

Indeks Hirscha według bazy Web of Science (WoS):

h=7

| | Przed doktoratem | Po doktoracie | Ogółem |
|--|---------------------|------------------|-----------|
| Ogólna liczba prac naukowych | 5 | 20 | 25 |
| Publikacje w czasopismach znajdujących się w bazie <i>Journal Citation Reports</i> (JCR) | 3 | 16 | 19 |
| Publikacje w czasopismach z poza bazy <i>Journal Citation Reports</i> (JCR) oraz autorstwo rozdziałów w monografiach w języku angielskim | 0 | 1 | 1 |
| Publikacje w czasopismach z poza bazy <i>Journal Citation Reports</i> (JCR) oraz autorstwo rozdziałów w monografiach w języku polskim | 2 | 3 | 5 |

Szczegółowy spis prac naukowych zawarto w załączniku 3 – „Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac”.

5.2 Prezentacja referatów i komunikatów naukowych na konferencjach krajowych i międzynarodowych

W ramach konferencji krajowych i międzynarodowych wygłosiłam **6** referatów, **2** wykłady na zaproszenie oraz zaprezentowałam **23** komunikaty posterowe.

Szczegółowy spis referatów i komunikatów naukowych zawarto w załączniku 3 „Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac” i 4 – „Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki”.

5.3 Udział w projektach badawczych krajowych i zagranicznych

1. Grant KBN No 4 T09A 100 25 ”Nowe czwartorzędowe sole pirydyniowe i ich ylidy” 2003/2004 – **grant promotorski**
2. Grant NCN 2011–14r. (3 lata), Nr N N204 444740 pt.: „Otrzymywanie i analiza nano- i mikro- warstw pochodnych rybozy i deoksyrybozy na podłożach organicznych i nieorganicznych.” – **Kierownik grantu**
3. Projekt realizowany podczas pobytu na stażu podoktorskim w Technische Universität Braunschweig 2008/2009 “Organic thin film functionalization of semiconductor substrates for molecular electronics applications.” BMBF grant 03X5513 (Junior Research Group “Nanotechnology” – **wykonawca**
4. Grant NCN 2011–14r. (3 lata), Nr. N N204 277240 pt.: ”Synteza fluorowanych pochodnych styrenowych i ich zastosowanie do tworzenia nowych materiałów polimerowych.” – **wykonawca**
5. Projekt Programu Juventus Plus Ministerstwa Nauki Szkolnictwa Wyższego w ramach

III konkursu, 2013-2014r. (2 lata), pt.: "Optymalizacja hybrydowych nanostruktur półprzewodników organicznych i przezroczystych tlenków przewodzących dla zastosowań w fotowoltaice." – **wykonawca**.

5.4 Nagrody wynikające z prowadzonych działań naukowych

- 2007 Stypendium FNP - krajowe stypendium wyjazdowe
- 2014 Nagroda zespołowa II stopnia J.M. Rektora Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu za osiągnięcia w pracy naukowej

