

Wydział Chemii i Farmacji
Uniwersytet Opolski
ul. Oleska 48
45-052 Opole
za pośrednictwem:
Rady Doskonałości Naukowej
pl. Defilad 1
00-901 Warszawa
(Pałac Kultury i Nauki, p. XXIV, pok. 2401)

Dawid Zych
(imię i nazwisko wnioskodawcy)

Instytut Chemii,
Wydział Chemii i Farmacji
Uniwersytet Opolski
ul. Oleska 48, 45-052 Opole
(miejsce pracy/jednostka naukowa)

Wniosek

z dnia 28.06.2024

o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie **nauk ścisłych i przyrodniczych** w dyscyplinie¹ **nauki chemiczne**

Określenie osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Osiągnięciem naukowym, który przedkładam jako rozprawę habilitacyjną jest cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b Ustawy zatytułowany:

Wpływ podstawienia mono-, di-, tri- i tetra- podstawionych pirenów w obszarze węzłowym oraz non-K na ich właściwości fotofizyczne

Wniosuję – na podstawie art. 221 ust. 10 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 zm.) – aby komisja habilitacyjna podejmowała uchwałę w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w głosowaniu ~~tajnym~~/**jawnym***²

Zostałem poinformowany, że:

Administratorem w odniesieniu do danych osobowych pozyskanych w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego jest Przewodniczący Rady Doskonałości Naukowej z siedzibą w Warszawie (pl. Defilad 1, XXIV piętro, 00-901 Warszawa).

Kontakt za pośrednictwem e-mail: kancelaria@rdn.gov.pl, tel. 22 656 60 98 lub w siedzibie organu. Dane osobowe będą przetwarzane w oparciu o przesłankę wskazaną w art. 6 ust. 1 lit. c) Rozporządzenia UE 2016/679 z dnia 27 kwietnia 2016 r. w związku z art. 220 - 221 oraz art. 232 – 240 ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, w celu przeprowadzenie postępowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego oraz realizacji praw i obowiązków oraz środków odwoławczych przewidzianych w tym postępowaniu.

¹ Klasyfikacja dziedzin i dyscyplin wg. rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 20 września 2018 r. w sprawie dziedzin nauki i dyscyplin naukowych oraz dyscyplin w zakresie sztuki (Dz. U. z 2018 r. poz. 1818).

² * Niepotrzebne skreślić.

Szczegółowa informacja na temat przetwarzania danych osobowych w postępowaniu dostępna jest na stronie www.rdn.gov.pl/klauzula-informacyjna-rodo.html

Podpisane elektronicznie przez Dawid
Mariusz Zych (Certyfikat kwalifikowany) w
dniu 2024-06-28.

(podpis wnioskodawcy)

Załączniki:

- Zał. 1. Wniosek w języku angielskim
- Zał. 2 Dane wnioskodawcy (wersja w języku polskim i angielskim)
- Zał. 3 Autoreferat (wersja w języku polskim i angielskim)
- Zał. 4 Wykaz osiągnięć naukowych (wersja w języku polskim i angielskim)
- Zał. 5 Oświadczenia współautorów (wersja w języku polskim i angielskim)
- Zał. 6 Odpis dyplomu nadania stopnia doktora (wersja w języku polskim i angielskim)
- Zał. 7 Cykl publikacji stanowiących osiągnięcie



**WYDZIAŁ
CHEMII I FARMACJI**
UNIWERSYTET OPOLSKI

dr inż. Dawid Zych

Katedra Chemii Nieorganicznej i Strukturalnej

Instytut Chemii

Wydział Chemii i Farmacji

Uniwersytet Opolski

ul. Oleska 48

45-052 Opole

tel. (77) 452-71-17

email: dawid.zych@uni.opole.pl; dawidzych92@gmail.com

AUTOREFERAT

DO WNIOSKU O PRZEPROWADZENIE POSTĘPOWANIA HABILITACYJNEGO

***Wpływ podstawienia mono-, di-, tri- i tetra- podstawionych pirenów
w obszarze węzłowym oraz non-K na ich właściwości fotofizyczne***

Opole 2024

1. Imię i nazwisko: Dawid Zych

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe lub artystyczne – z podaniem podmiotu nadającego stopień, roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej.

- **Stopień doktora nauk chemicznych – 14 maja 2019** (z wyróżnieniem)
Uniwersytet Śląski w Katowicach, Dziedzina nauk ścisłych i przyrodniczych, nauki chemiczne, chemia nieorganiczna i organiczna
Promotor: Prof. dr hab. Jan Grzegorz Małecki

"Jedno- i dwurdzeniowe związki koordynacyjne rutenu, osmu i irydu z cyklometalującymi ligandami pirenowymi i terpirydynowymi"

- **Tytuł magistra chemii – 28 kwietnia 2016** (z wynikiem celującym)
Uniwersytet Śląski w Katowicach, Chemia, specjalność chemia podstawowa
Promotor: Prof. dr hab. inż. Stanisław Krompiec

"Synteza monomerów nowych potencjalnych polimerów przewodzących dla organicznej elektroniki, nowe układy katalityczne"

- **Tytuł inżyniera technologii chemicznej 24 czerwca 2014** (z wynikiem celującym)
Uniwersytet Śląski w Katowicach, Technologia Chemiczna, specjalność technologia nieorganiczna i organiczna
Promotor: Prof. dr hab. inż. Stanisław Krompiec

"Synteza 1,4-bis(2,2'-bitiofen-5-ylo)-1,3-butadiynu z 5-jodo-2,2'-bitiofenu w skali powiększonej"

- **Studia podyplomowe**

- **2024** Wyższa Szkoła Kształcenia Zawodowego, Zarządzanie bezpieczeństwem i higieną pracy (BHP)
- **2022** Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego w Warszawie, Ekologiczny transport przyszłości

"Ocena obecnego stanu oraz rozwoju pojazdów napędzanych energią elektryczną – uwarunkowania, zagrożenia, czynniki prorozwojowe, bariery rozwoju"

- **2021** Wyższa Szkoła Biznesu – National Louis University, Master of Business Administration (MBA)
- **2021** Wyższa Szkoła Biznesu – National Louis University, Przygotowanie pedagogiczne do zawodu nauczyciela

- **2021** Wyższa Szkoła Kształcenia Zawodowego, Nauczanie matematyki i fizyki w szkołach podstawowych i ponadpodstawowych

"Zalety i zagrożenia wynikające ze stosowania nowoczesnych środków dydaktycznych w nauczaniu matematyki"

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych.

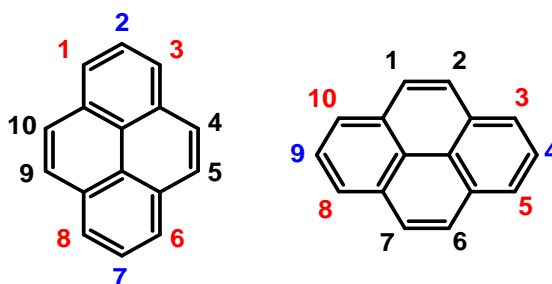
- **01.10.2021** - nadal Adiunkt, Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii i Farmacji, Opole
- **01.10.2020 - 30.09.2021** Adiunkt, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej, Wrocław

4. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 z późn. zm.). Omówienie to winno dotyczyć merytorycznego ujęcia przedmiotowych osiągnięć, jak i w sposób precyzyjny określać indywidualny wkład w ich powstanie, w przypadku, gdy dane osiągnięcie jest dziełem współautorskim, z uwzględnieniem możliwości wskazywania dorobku z okresu całej kariery zawodowej.

4.1. Wprowadzenie i omówienie celu naukowego

Historia pirenu sięga pierwszej połowy XIX wieku, kiedy to Auguste Laurent (1807-1853) odkrył w pozostałościach po destylacji smoły pogazowej ten wielopierścieniowy węglowodór aromatyczny [1,2]. Kolejnym kluczowym etapem z punktu widzenia jego poznania była opublikowana w 1937 roku praca Heinricha Vollmanna i współpracowników *"Beiträge zur Kenntnis des Pyrens und seiner Derivate"*, w której opisano bromowanie pirenu ze stechiometryczną ilością bromu w nitrobenzenie, co skutkowało powstaniem izomerów: 1-bromopirenu; 1,6- i 1,8-dibrompirenów, a także 1,3,6-tribromopirenu i 1,3,6,8-tetrabromopirenu [3]. Od tego czasu zarówno w kwestii pozyskiwania samego pirenu jak również otrzymywania jego pochodnych poprzez odpowiednie funkcjonalizacje, w literaturze zostało opublikowanych bardzo wiele prac naukowych [4–6]. Tak duże zainteresowanie pochodnymi pirenu wynika przede wszystkim z obecności nadmiarowych elektronów π w cząsteczce, dobrej stabilności termicznej, zdolności do transportu ładunku, jak również szerokiego spektrum możliwości jego funkcjonalizacji. To wszystko przekłada się na zastosowanie pochodnych pirenu w różnych gałęziach szeroko rozumianej elektroniki organicznej, takich jak organiczne diody elektroluminescencyjne (OLED) [7–9], ogniwa fotowoltaiczne (OPV) [10], jak również organiczne tranzystory polowe (OFET)

[11,12]. Co ważne, analizując literaturę przedmiotu można stwierdzić, że pomimo tak długiego okresu jak i ilości opublikowanych prac, tematyka pirenu nie została wyczerpana. Współczesne badania skupiają się już nie tyle co na dostrajaniu właściwości fotofizycznych struktur opartych na pirenieniu poprzez przyłączanie nowych podstawników, ale określeniu jak pozycja podstawienia wpływa na właściwości fotofizyczne jego pochodnych. Pierwszym krokiem w świadomym podejściu do otrzymywania układów dla konkretnych zastosowań, jest wybranie odpowiedniego obszaru/obszarów pirenu do jego funkcjonalizacji. W tym zakresie można wyróżnić następujące obszary: region non-K (pozycje 1, 3, 6, 8), region K (pozycje 4, 5, 9, 10) oraz pozycje węzłowe (pozycje 2 i 7) (Rysunek 1). Unikalna struktura elektronowa pirenu powoduje, że reakcja elektrofilowego podstawienia aromatycznego ma miejsce głównie w pozycjach 1, 3, 6 i 8, podczas gdy pozycje 2, 4, 5, 7, 9 i 10 nie wykazują tej samej reaktywności ze względu na ograniczenia energetyczne. Ta rozbieżność wynika z faktu, że pozycje 1, 3, 6 i 8 mają o około 8,8 kcal/mol niższą energię w porównaniu z pozycjami 4, 5, 9 i 10, podczas gdy różnica energii pomiędzy regionem non-K a pozycjami węzłowymi (pozycje 2 i 7) jest znacznie wyższa i wynosi około 20,5 kcal/mol [13,14].



rekomendowane przez IUPAC

Rysunek 1. Pozycje pirenu (czerwone pozycje: region non-K; niebieskie pozycje: obszar węzłowy; czarne pozycje: region K).

W związku z powyższym otrzymywanie związków opartych na strukturze pirenu opiera się głównie na funkcjonalizacji jego struktury w obszarze non-K (pozycje 1, 3, 6 i 8). Analizując ilość pochodnych pirenu zawierających cykliczne podstawniki, największą z nich stanowią 1-podstawione pireniny, następnie 1,3,6,8-tetrapodstawione pochodne, natomiast dipodstawione pireniny – 1,6 i 1,8 są omawiane znacznie rzadziej, wśród pirenów dipodstawionych w regionie non-K najwięcej cząsteczek zawiera podstawniki w pozycjach 1 i 6, a następnie 1 i 8, podczas gdy 1,3-dipodstawione pireniny są praktycznie nieznane. Co więcej, 1,3,6-tripodstawione pireniny omówione są tylko na kilku przykładach. Biorąc pod uwagę pozycje węzłowe 2 i 2,7, związki te opisano w takim samym stopniu, jak dipodstawione pireniny (1,6 i 1,8), z przewagą dla 2-podstawionych pirenów [15]. W literaturze przedstawiono również jedną pochodną

pirenu podstawionego w dwóch obszarach – pozycja węzłowa i obszar non-K (pozycje 1 i 7) [16].

Na przestrzeni ostatnich lat pojawiają się badania dotyczące określenia wpływu liczby podstawników jak i sposobu podstawienia na właściwości fotofizyczne układów, gdzie piren pełni rolę struktury wiodącej. Yosuke Niko i współpracownicy w 2013 roku opublikowali artykuł na temat pochodnych alkilopirenów, w tym mono-, di-, tri- i tetrabutylu pirenów, podstawionych w różnych pozycjach [17]. Zaobserwowano, że zwiększenie liczby grup butylowych powoduje przesunięcie zarówno absorpcji jak i emisji w stronę dłuższych długości fal oraz wzrost wydajności kwantowej fluorescencji. Większość obserwowanych efektów podstawienia wynika z koniugacji między grupami butylowymi a pirenem. Ta koniugacja powoduje destabilizację najwyższego zajętego orbitalu molekularnego (HOMO) pirenu. Ustalono również, że modyfikacje grupy alkilowej nie zmieniają istotnie właściwości badanych pochodnych. W kolejnych latach badania tego typu były kontynuowane przez inne zespoły naukowe na przykładzie pirenów podstawionych przez grupy (hetero)aromatyczne: 2016 R. K. Konidena (piren – tienylofenotiazyna) [18], 2018 V. Joseph (piren - etynylocyjanokarbazol) [19], 2020 Q. Lu (piren - pirydyna) [20], 2022 Y. Ahn (piren - *N*-fenylnaftaleno-1-amina) [16], 2023 X. Song (piren - 2,5-dimetoksyfenyl) [21].

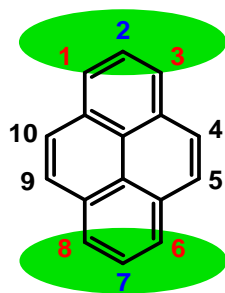
W przypadku 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów, które zawierają dwa rodzaje grup, wyróżniamy trzy prace Zhonghai Ni i współpracowników z 2016, 2017 i 2024 roku, gdzie zaprezentowano pochodne z grupami podstawionymi symetrycznie w stosunku do krótkiej osi symetrii pirenu, zawierającymi m.in. grupy takie jak: 4-*tert*-butylofenylowe, 4-(difenyloamino)fenylowe, 4-(karbazol-9-ilo)fenylowe i inne [22–24]. Brak jest jednak danych dotyczących różnic we właściwościach fotofizycznych w przypadku 1,3,6,8-tetrapodstawionych pochodnych pirenu zawierających te same cztery podstawione grupy w stosunku do układów zawierających dwa rodzaje podstawników.

W kwestii zastosowania pochodnych pirenu można wyróżnić barwniki oparte na jego strukturze, które stanowią obiecujące rozwiązanie dla ogniw słonecznych uczulonych barwnikiem (DSSC), dzięki ich znacznej absorpcji w zakresie widzialnym jak i bliskiej podczerwieni, co przekłada się na zwiększoną skuteczność urządzeń DSSC poprzez efektywne zbieranie i przekształcanie światła słonecznego w energię elektryczną. Badania przeprowadzone przez G. Paramaguru i współpracowników [25] oraz A. Kathiravan i współpracowników [26] wykazały istotną rolę grup kotwiczących w monopodstawionych pirenach (w pozycji 1), takich jak -COOH, -CN czy kwas cyjanoakrylowy, w kontekście ich zastosowania w DSSCs. Wyniki tych badań sugerują, że odpowiednie grupy kotwiczące mogą

zwiększyć efektywność adsorpcji barwników pirenowych na powierzchni materiału półprzewodnikowego, co przekłada się na wyższą skuteczność urządzenia. Dodatkowo, badania te dostarczają istotnych informacji na temat wpływu różnych grup kotwiczących na właściwości barwników pirenowych w kontekście ich zastosowania w DSSCs, co może prowadzić do optymalizacji tych związków w celu dalszego zwiększenia ich efektywności.

Innym zastosowaniem odpowiednio zaprojektowanych pochodnych pirenu jest użycie ich jako ligandów NCN-cyklometalujących w związkach koordynacyjnych. W ostatnich latach tego typu badania wykazały istotne zależności między naturą NCN-cyklometalujących ligandów mostkujących, skoordynowanego metalu czy natury ligandów terminalnych, co determinuje właściwości fotofizyczne tego typu układów [27–29]. W 2018 roku na przykładzie jednordzeniowych związków koordynacyjnych osmu z NCN-cyklometalującymi ligandami pirenowymi, różniącymi się grupami heteroarylowymi, wykazano w sposób zarówno eksperymentalny jak i teoretyczny, istotne różnice pomiędzy właściwościami i zachowaniem podczas utleniania w zależności od natury grupy heteroarylowej koordynującej osm [30]. Było to spowodowane m.in. różnym udziałem poszczególnych podstawników w tworzeniu orbitali granicznych badanych ligandów NCN-cyklometalujących.

Głównym celem przeprowadzonych w ramach osiągnięcia naukowego badań było określenie wpływu liczby podstawników heteroarylowych, ich natury i podstawienia pirenu w obszarze non-K i pozycjach węzłowych na właściwości fotofizyczne układów opartych na strukturze pirenu (Rysunek 2).



Rysunek 2. Zakres funkcjonalizacji pirenu w ramach niniejszego osiągnięcia naukowego – pozycje 1, 3, 6 i 8 (obszar non-K) oraz pozycje 2 i 7 (pozycje węzłowe).

Nowatorski charakter prowadzonych badań polegał przede wszystkim na racjonalizacji podejścia do funkcjonalizacji pirenu i znalezieniu takich sposobów jego podstawienia w celu otrzymania materiałów do zastosowań jako wydajne fluorofory, ligandy cyklometalujące, czy też warstwy aktywne w ogniwach fotowoltaicznych. Co ważne, prowadzone badania miały

zarówno charakter eksperymentalny, jak i teoretyczny (obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT).

W związku z powyższym zakres badań obejmował:

a) krytyczną analizę literatury w zakresie pochodnych pirenu, ich syntezy i badania właściwości fotofizycznych;

b) projektowanie, przy wykorzystaniu metod obliczeniowych opartych na teorii funkcjonału (DFT), związków docelowych. Obejmowało to zbudowanie modelu fenomenologicznego struktura-właściwości, umożliwiającego zbadanie wpływu ilości podstawników, ich natury i podstawienia pirenu w obszarze non-K i pozycjach węzłowych na właściwości fotofizyczne otrzymanych układów poprzez uzyskane informacje o geometrii, orbitalach granicznych, przerwach energetycznych, energiach stanu podstawowego i wzbudzonego, momentach dipolowych oraz parametrach fizycznych. Wykorzystanie czasowo zależnej teorii funkcjonałów gęstości (TD-DFT) pozwalało na kompleksową interpretację właściwości optycznych (widma absorpcji i emisji) poprzez określenie wzbudzonych stanów elektronowych oraz analizę NTO (natural transition orbital);

c) syntezę związków pośrednich, niezbędnych do syntezy bloków budulcowych, a następnie syntezę wybranych według ściśle opracowanej strategii syntetycznej, docelowych pochodnych pirenu;

d) kompleksowe badania fotofizyczne otrzymanych związków, obejmujące pomiary widm absorpcyjnych i emisyjnych w roztworze (badania w rozpuszczalnikach o różnej polarności) oraz w ciele stałym w zakresie widm UV-Vis, z uwzględnieniem czasów życia stanów wzbudzonych i wydajności kwantowej fluorescencji, oraz analizę termogravimetryczną (TGA);

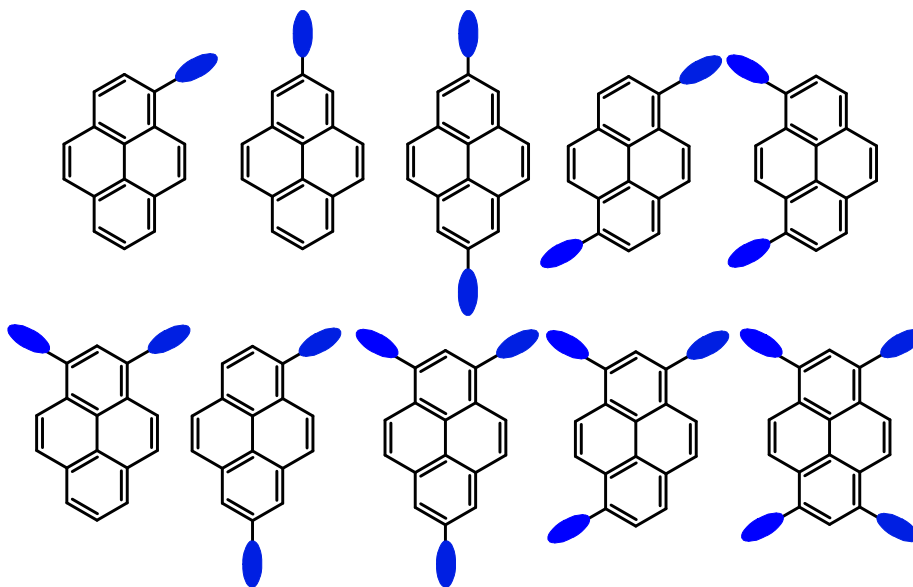
e) interpretację otrzymanych wyników i określenie wpływu ilości podstawników, ich natury i podstawienia pirenu w obszarze non-K i pozycjach węzłowych na właściwości fotofizyczne otrzymanych układów, oraz określenie potencjalnego zastosowania otrzymanych związków w obszarze organicznej elektroniki;

f) wybór związków do dalszych modyfikacji strukturalnych.

Efektom przedstawionych badań jest cykl 11 publikacji naukowych [**H1-H11**], w tym 3 prace monoautorskie [**H5, H7, H11**]. Udział Habilitanta w pracach wieloautorskich został określony w pkt 1, ppkt 1 w załączniku 4.

4.2. Mono-, di-, tri-, tetrapodstawione pireny zawierające jeden rodzaj podstawnika [H1-H7]

Pierwsza grupa prac naukowych poświęcona jest mono-, di-, tri- oraz tetrapodstawionym pirenom zawierającym jeden rodzaj podstawnika w swojej strukturze, co zostało przedstawione schematycznie na Rysunku 3.

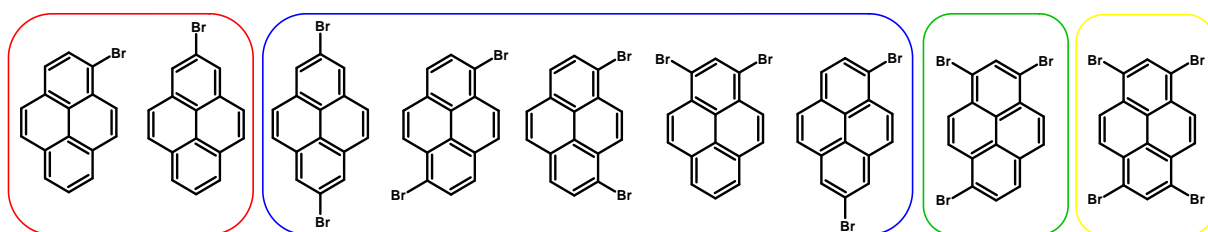


Rysunek 3. Mono-, di-, tri-, tetrapodstawione pireny zawierające jeden rodzaj podstawnika.

[H1] Komercyjnie dostępny piren, ze względu na swoją przystępną cenę (330 zł/100 g, Thermo Scientific, Acros), jest powszechnie używany jako wyjściowy materiał do syntezy pochodnych pirenu w badaniach naukowych. Strategie syntezy opierają się głównie na otrzymywaniu bromopochodnych pirenu. Pomimo obfitości literatury dotyczącej syntezy bromopirenów, wiele publikacji różni się w opisie warunków reakcji i uzyskiwanych produktów, co prowadzi do sprzeczności i zawilości. To komplikuje pierwszy etap syntezy - otrzymywanie prekursorów do dalszych reakcji. Jest to głównie spowodowane różnicami w reaktywności poszczególnych pozycji pirenu. Unikalna struktura elektronowa pirenu sprawia, że reakcje elektrofilowego podstawienia aromatycznego zachodzą głównie w pozycjach 1-, 3-, 6- i 8-, podczas gdy pozycje 2-, 4-, 5-, 7-, 9- i 10- są mniej reaktywne z powodu ograniczeń energetycznych. Aktywne pozycje pirenu (1-, 3-, 6- i 8-) wykazują jednakową reaktywność wobec podstawienia, co prowadzi do powstawania wielu produktów, których skład można kontrolować poprzez stosunek stechiometryczny substratów, rodzaj rozpuszczalnika i warunki reakcji.

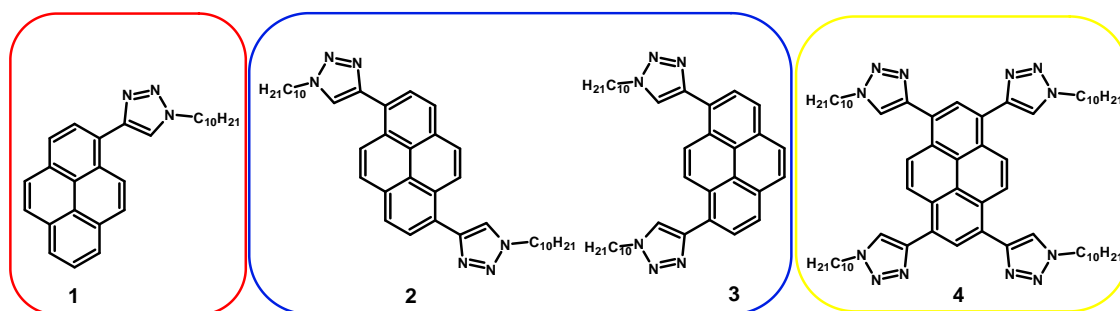
W ramach pracy [H1] przedstawiono kompleksowy przegląd metod wprowadzania atomów bromu w odpowiednie pozycje pirenu w obszarze non-K i pozycjach węzłowych, uwzględniając zmiany w podejściu do otrzymywania bromopochodnych mające miejsce na

przestrzeni wielu lat. Ponadto, opierając się na wieloletnim doświadczeniu w syntezie pirenu, przedstawiono wyniki dotyczące optymalnych warunków reakcji (czas, wydajność, koszt, prostota, stopień oczyszczenia i czystość izomerów) oraz metod oczyszczania, mających na celu uzyskanie mono-, di-, tri- i tetrabromopirenów w obszarze non-K (1-, 3-, 6-, 8-) oraz pozycjach węzłowych (2-, 7-), wraz z charakterystyką spektroskopową ^1H NMR, która pozwoliła na pokazanie różnic pomiędzy poszczególnymi analogami i izomerami bromopirenów poprzez zarejestrowane widma w tym samym rozpuszczalniku i w tych samych warunkach pomiarowych. Praca [H1] zawiera syntezę 1-bromopirenu, 2-bromopirenu, 2,7-dibromopirenu, 1,6-dibromopirenu, 1,8-dibromopirenu, 1,3-dibromopirenu, 1,7-dibromopirenu, 1,3,6-tribromopirenu i 1,3,6,8-tetrabromopirenu (Rysunek 4).



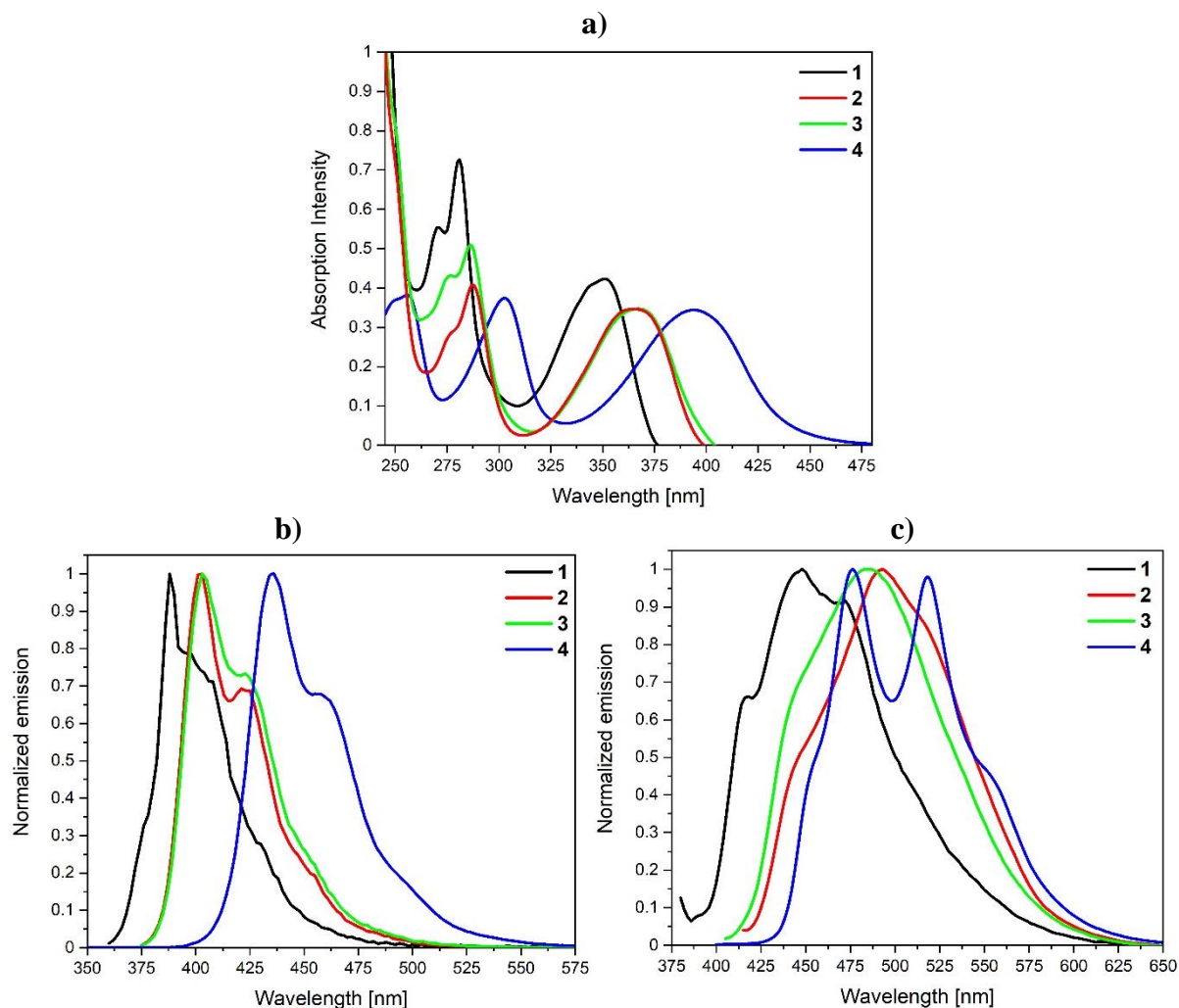
Rysunek 4. Mono-, di-, tri-, tetrabromopireny [H1].

[H2] 1-Bromopiren, 1,6-dibromopiren, 1,8-dibromopiren oraz 1,3,6,8-tetrabromopiren zostały wykorzystane do syntezy pochodnych pirenu **1–4**, zawierających w swojej strukturze podstawniki akceptorowe - 1-decylo-1*H*-1,2,3-triazolyłowe, przyłączone do rdzenia – pirenu, wiązaniem węgiel-węgiel (Rysunek 5). Pochodne te otrzymano w wyniku dwuetapowej reakcji. Pierwszy etap polegał na sprzęganiu krzyżowym Sonogashiry pomiędzy bromopochodną a trimetylosililoacetylenem (TMSA) w obecności układu katalitycznego $[\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4]/\text{CuI}$. Następnie uzyskane etynyłowe pochodne pirenu zostały wykorzystane w kolejnym etapie - reakcji cykloaddykcji 1,3-dipolarnej katalizowanej przez Cu(I) z azydkiem decylu. Szczegółowe wyniki badań zostały opisane w pracy [H2].



Rysunek 5. Mono-, di- i tetra- pochodne pirenu zawierające grupy 1-decylo-1*H*-1,2,3-triazolyłowe **1–4**.

Uzyskane wyniki właściwości termicznych, oparte na analizie termogravimetrycznej oraz właściwości optyczne - absorpcja, emisja w roztworze i w proszku, wydajność kwantowa fluorescencji oraz efektywny czas zaniku fluorescencji w roztworze (Rysunek 6 i Tabela 1) - zostały zanalizowane w odniesieniu do liczby podstawników.



Rysunek 6. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (DCM) oraz (c) widma emisji w proszku pochodnych pirenu 1-4.

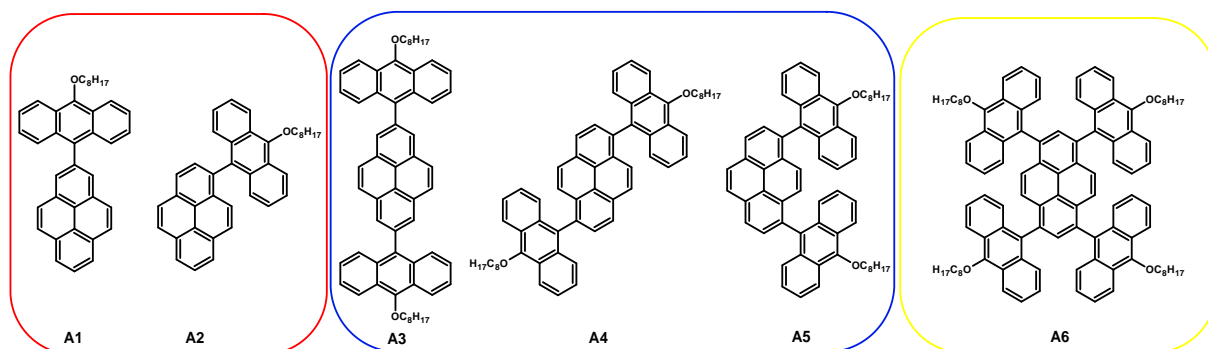
Tabela 1. Właściwości fotofizyczne w cieczy (DCM, $c = 10^{-5}$ mol/L) oraz w proszku pochodnych pirenu 1-4.

		λ_{abs} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
1	DCM	271, 281, 351	388	37	9.25 3.04 (33.99) 13.69 (60.01)	3.19
	proszek	283, 307, 322, 336, 367	418, 448, 472	-	-	2.63
2	DCM	277, 287, 365	403, 421	64	3.72 0.04 (12.37) 4.24 (87.63)	3.09

	proszek	284, 326, 364	493	-	-	2.52
					2.37	
3	DCM	277, 286, 367	403, 423	63	0.03 (18.07) 2.89 (81.93)	3.08
	proszek	276, 326, 366	483	-	-	2.57
					2.03	
4	DCM	256, 302, 391	436, 458	72	0.15 (10.52) 2.25 (89.48)	2.85
	proszek	278, 329, 370	476, 518	-	-	2.39

Stwierdzono silny wpływ liczby podstawników w regionie non-K pirenu na właściwości fotofizyczne, zwłaszcza optyczne. Jednocześnie nie zaobserwowano wpływu podstawienia (mono-, di- i tetra-) w badanej grupie związków na stabilność termiczną cząsteczek. Najbardziej stabilne są związki z dwoma podstawnikami (**2** i **3**), natomiast monopodstawiona pochodna (**1**) jest najmniej stabilna termicznie, choć wciąż charakteryzująca się wysoką temperaturą 5% i 10% ubytku masy. Obliczenia teoretyczne wykazały, że rosnąca liczba podstawników zmniejsza udział pirenu w tworzeniu orbitali granicznych dla HOMO z 88 do 72% i LUMO z 91 do 74%, przy jednoczesnym wzroście udziału 1-decylo-1*H*-1,2,3-triazolyłu. Wartości przerwy energetycznej wykazują tę samą tendencję, najwyższa została obliczona dla monopodstawionego związku (**1**) $\Delta E=3.62$ eV, a najniższa dla tetrapodstawionego (**2**) $\Delta E=3.16$ eV. Biorąc pod uwagę wyniki obliczeń TD-DFT, nie obserwuje się różnic co do charakteru przejść związanych z absorpcją i emisją w odniesieniu do liczby podstawników triazolylowych. Wraz ze wzrostem koniugacji wynikającym ze wzrostu liczby podstawników triazolylowych, widma absorpcji i jak i emisji, zarówno w roztworze i ciele stałym, są przesunięte w kierunku fal o niższej energii (do 50 nm), zwiększając przy tym wydajność kwantową fluorescencji z 37 do 72% i obniżając efektywny czas zaniku fluorescencji z 9.25 do 2.03 ns.

[H3] Otrzymane wyniki badań nad układami piren-triazol **1–4**, w których triazol pełni funkcję grupy akceptorowej, stanowiły inspirację do sprawdzenia zachodzących zmian we właściwościach fotofizycznych w przypadku zamiany grupy akceptorowej na donorową, co zostało przedstawione w pracy **[H3]**. W tym celu wykorzystano motyw antracenyowy z podstawnikiem oktyloksylowym, który zapewnił odpowiednią rozpuszczalność związkowi docelowemu **A1–A6** (Rysunek 7). Co istotne, badania te zostały rozszerzone także o pochodne pirenu, w których podstawniki znajdują się w pozycjach węzłowych (2 oraz 7).



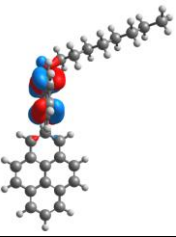
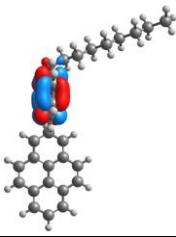
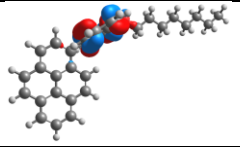
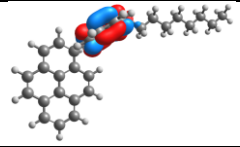
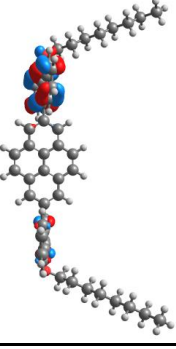
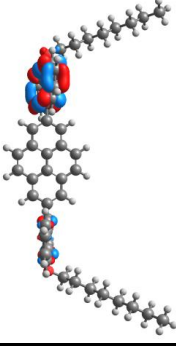
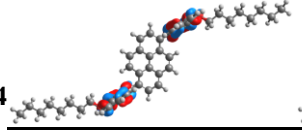
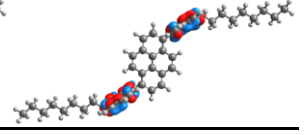
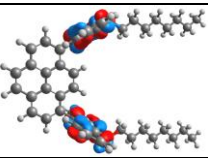
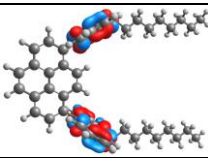
Rysunek 7. Mono-, di- i tetra- pochodne pirenu zawierające grupy antracenyłowe **A1–A6**.

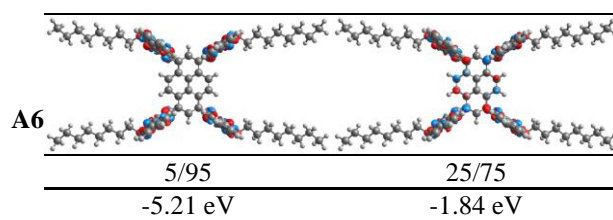
Zaprojektowane układy piren-antracen zostały otrzymane w wyniku wieloetapowej reakcji. W przypadku pochodnych **A2**, **A4**, **A5** i **A6**, odpowiednie bromopochodne pirenu zostały poddane reakcji z bis(pinakoliniano)diborem w obecności $[\text{Pd}(\text{dppf})_2\text{Cl}_2]$, co skutkowało uzyskaniem związków boroorganicznych odpowiednich do kolejnej reakcji katalizowanej $\text{Pd}(0)$ - sprzęgania krzyżowego Suzukiego-Miyaura. W przypadku pozycji węzłowych, tj. pochodnych **A1** i **A3**, boroorganiczne pochodne uzyskano poprzez zmodyfikowane bezpośrednie borylowanie, katalizowane przez kompleks Ir. Ta modyfikacja jest istotna w przypadku syntezy 2-podstawionych pochodnych boroorganicznych, gdyż stosowanie literaturowej ilości 4,4,5,5-tetrametylo-2-(piren-2-ylo)-1,3,2-dioksaborolanu [31] prowadzi do uzyskania 2,7-dipodstawionego pirenu zamiast oczekiwanej 2-podstawionej pochodnej, co zaznaczono również w ramach pracy [H1]. Docelowe pochodne **A1–A6** zostały otrzymane w reakcji pochodnych boroorganicznych z 9-bromo-10-oktyloksyantracenenem w obecności układu katalitycznego $[\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4]/\text{K}_3\text{PO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ w dimetoksyetanie (DME).

Analiza orbitali molekularnych wykazała w większości przypadków znaczący i dominujący udział antracenu w tworzeniu orbitali HOMO (94-95%) oraz LUMO (96-97%), z jednym wyjątkiem dla związku tetrapodstawionego **A6**, gdzie udział motywu antracenowego w przypadku orbitalu LUMO spada do 75% (Tabela 2). Co więcej, wraz z rosnącą liczbą podstawników obserwowano minimalny wpływ na energie najwyższego zajętego orbitalu molekularnego i najniższego niezajętego orbitalu molekularnego. W konsekwencji przerwy energetyczne ΔE dla związków **A1–A6** mieszczą się w wąskim przedziale 3.37 - 3.46 eV. Jest to obserwacja przeciwna do sytuacji opisanej w pracy [H2], gdzie podstawnik pełnił rolę akceptora, a rosnąca liczba podstawników zmniejszała udział pirenu w tworzeniu orbitali granicznych HOMO i LUMO na rzecz udziału 1-decylo-1*H*-1,2,3-triazolyłu. Ponadto, wartości przerwy energetycznej zmieniały się znacznie wraz ze zwiększającą się ilością podstawników (od 3.16 do 3.62 eV). Analizując struktury obliczonych cząsteczek **A1–A6**, można zauważyć zdecydowane odchylenie od obserwowanej zarówno w pracy [H2], jak i opisanych w literaturze

pochodnych pirenu, ułożenie przestrzenne podstawników w stosunku do rdzenia. W tym przypadku podstawniki znajdują się w płaszczyźnie praktycznie prostopadłej do płaszczyzny struktury wiodącej, a także wykazują znaczące zmiany pod wpływem wzbudzenia. Ogólna tendencja obserwowana dla pochodnych pirenu wskazuje na współpłaszczyznowe ułożenie podstawników względem rdzenia.

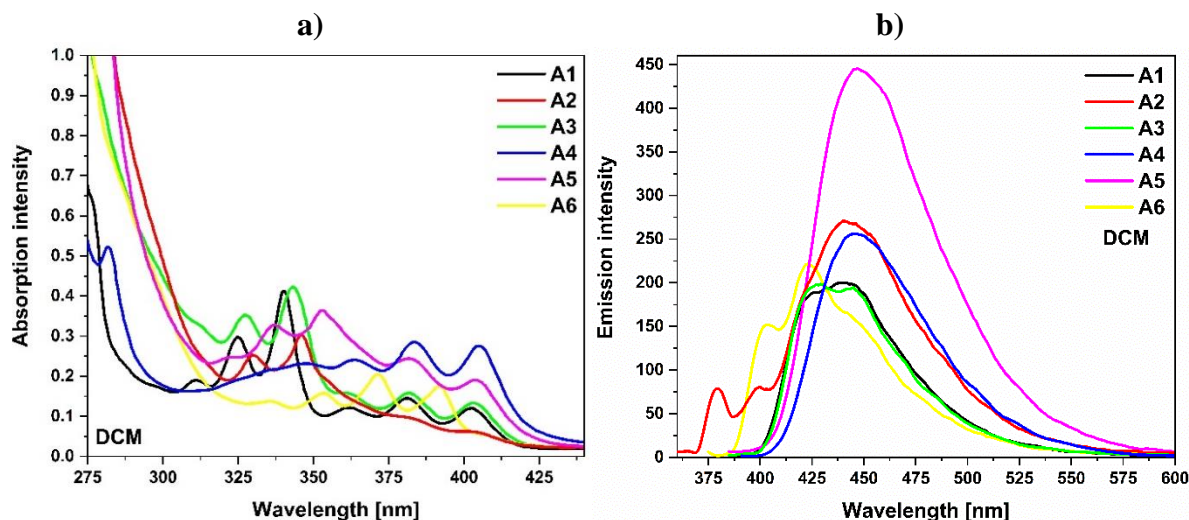
Tabela 2. Orbitale graniczne wraz z energiami [eV] oraz udziałem piren/antracen w ich tworzeniu, obliczone metodą DFT (B3LYP/6-31G(d,p)) dla związków **A1–A6**.

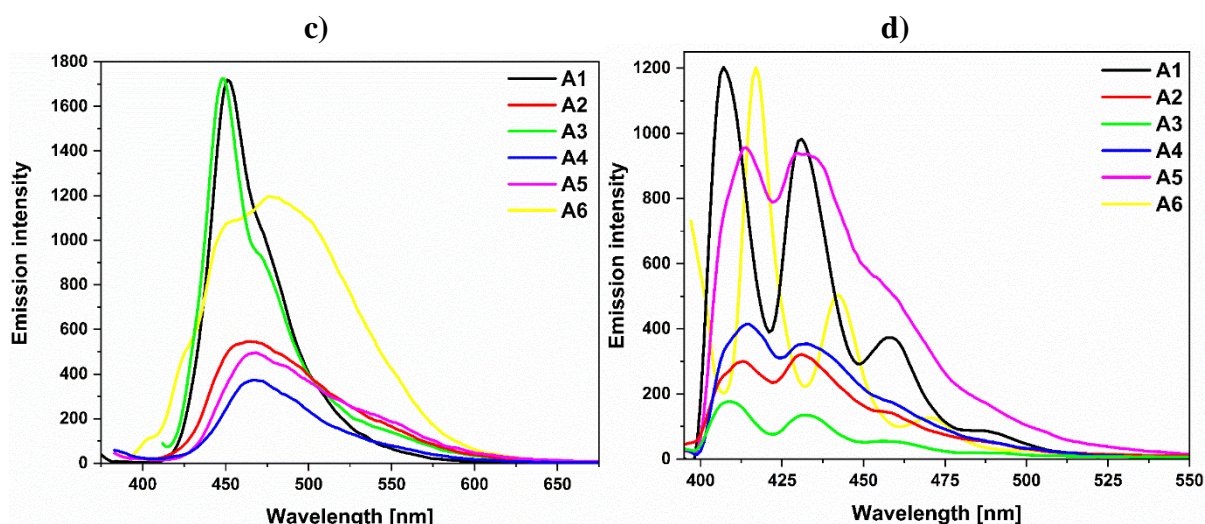
	HOMO	LUMO
A1		
	6/94	4/96
	-5.19 eV	-1.76 eV
A2		
	5/95	4/96
	-5.25 eV	-1.79 eV
A3		
	6/94	4/96
	-5.20 eV	-1.78 eV
A4		
	5/95	4/96
	-5.25 eV	-1.80 eV
A5		
	6/94	3/97
	-5.24 eV	-1.80 eV



W kwestii właściwości termicznych, wśród związków **A1–A6**, monopodstawiony w pozycji 2 piren **A1** wyróżnia się najwyższymi wartościami 5 i 10% ubytku masy, co wskazuje na wysoką stabilność termiczną. Jednakże monopodstawiony analog **A2**, w którym podstawienie nastąpiło w pozycji 1, wykazuje znacznie mniejszą stabilność termiczną o ponad 100°C. Stabilność termiczna dipodstawionego związku w pozycjach 2 i 7 (**A3**), jest bardzo podobna do stabilności **A2**, z wyjątkiem, którym jest o 35% wyższa zawartość stałej pozostałości w temperaturze 600°C dla związku **A3**. Dipodstawione pireny **A4** i **A5** wykazują lepszą stabilność termiczną w porównaniu z ich tetrapodstawionym odpowiednikiem **A6** i dipodstawionym związkiem **A3**.

Otrzymane pochodne zostały szeroko scharakteryzowane pod kątem właściwości optycznych, wykonano badania w rozpuszczalnikach o różnej polarności. Przykładowe widma absorpcji oraz emisji zarejestrowane w dichlorometanie (DCM) wraz z widmami emisji w proszku oraz widmami emisji w niskiej temperaturze 77 K (MeOH:EtOH 1:4, v/v) zostały zaprezentowane na Rysunku 8 i w Tabeli 3.





Rysunek 8. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (DCM), (c) widma emisji w proszku, (d) widma emisji w niskiej temperaturze 77 K (MeOH:EtOH 1:4, v/v) pochodnych pirenu **A1–A6**.

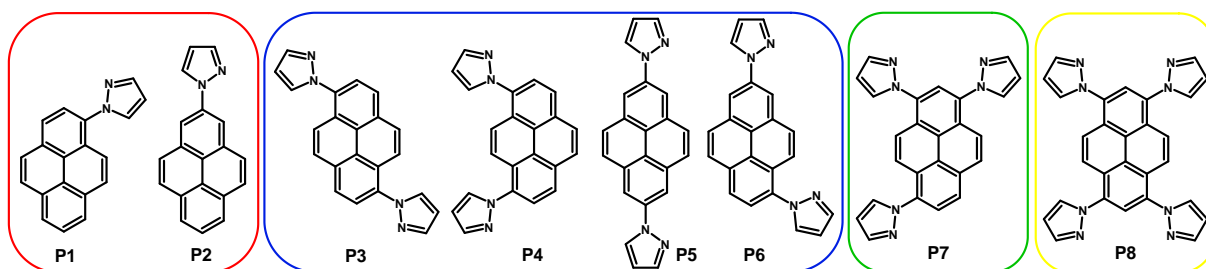
Tabela 3. Właściwości fotofizyczne w cieczy (DCM oraz MeOH:EtOH 1:4, v/v w niskiej temperaturze 77 K, $c = 10^{-5}$ mol/L) oraz w proszku pochodnych pirenu **A1–A6**.

		λ_{abs} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
A1	DCM	311, 325, 340, 362, 281, 403	426 ^{sh} , 441	47	3.00 2.66 (77.82), 4.17 (22.18)	2.81
	MeOH: EtOH 77 K	-	407, 431, 458	-	6.37	-
	proszek	-	451	18	229.75	-
A2	DCM	330, 346, 402	379 ^{sh} , 400 ^{sh} , 440	50	3.16 2.21 (71.81), 5.59 (28.19)	2.82
	MeOH: EtOH 77 K	-	413, 431, 458	-	4.57 1.77 (42.30), 6.63 (57.70)	-
	proszek	-	465	2	133.33	-
A3	DCM	329, 345, 383, 404	429, 445	38	2.56	2.79
	MeOH: EtOH 77 K	-	409, 432, 459	-	5.96 4.86 (83.92), 11.71 (16.08)	-
	proszek	-	448	8	115.42	-
A4	DCM	347, 364, 384, 405	446	46	4.06 1.68 (11.74), 4.38 (88.26)	2.78
	MeOH: EtOH 77 K	-	415, 432	-	4.46 1.58 (11.64), 4.84 (88.36)	-
	proszek	-	468	1	195.54	-
A5	DCM	338, 354, 383, 404	447	74	3.70 1.89 (43.26), 5.08 (56.74)	2.78

				4.20	
	MeOH:			1.57 (28.06),	-
	EtOH 77 K	-	414, 430	5.22 (71.94)	
	proszek	-	468	153.22	-
				4.89	
	DCM	337, 354, 372, 393	423	4.56 (93.86), 10,00 (6.14)	2.93
				10.92	
A6	MeOH:			4.03 (12.35),	-
	EtOH 77 K	-	417, 442, 471	11.89 (87.65)	
	proszek	-	453 ^{sh} , 478	111.05	-

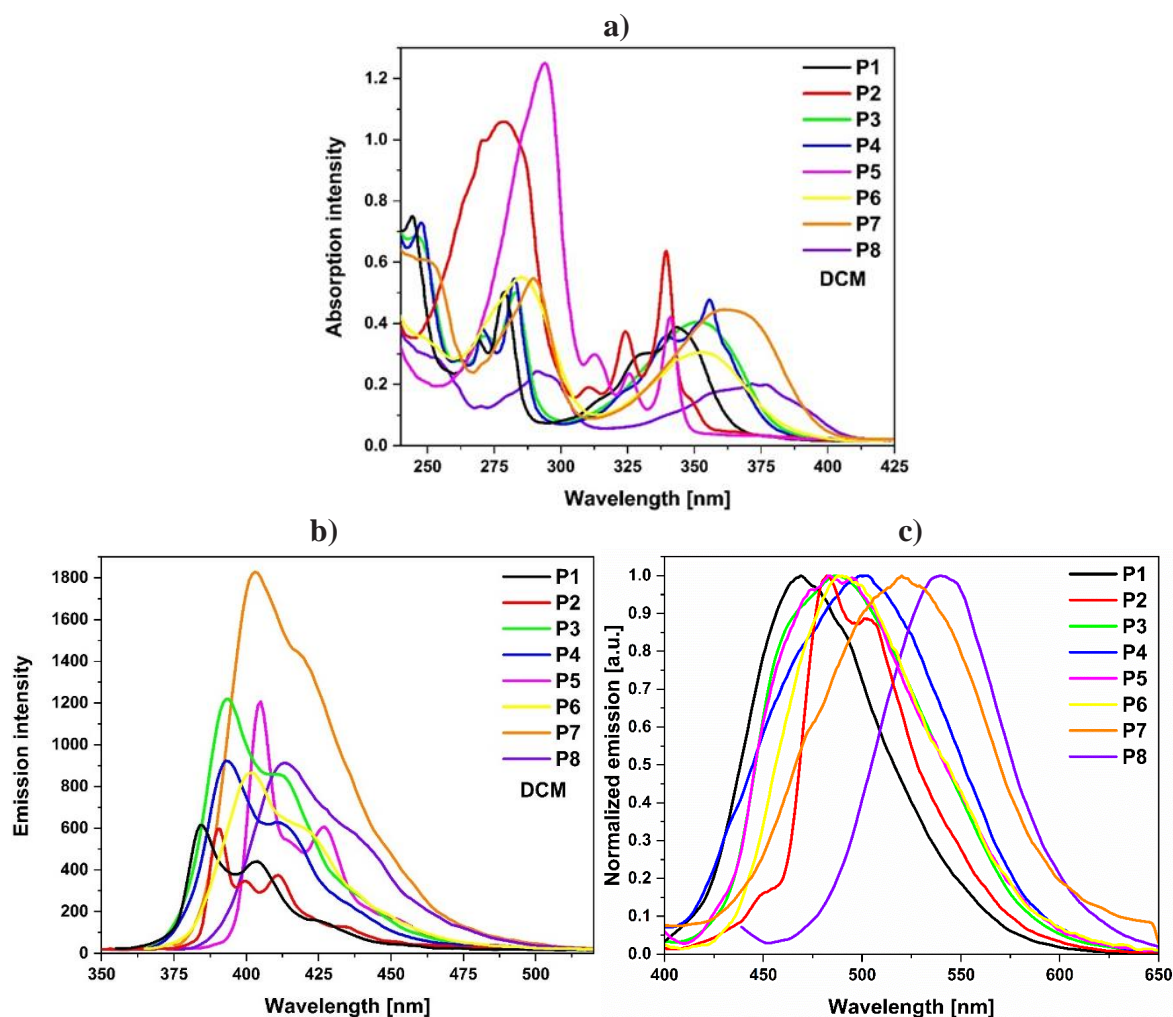
Mono- i dipodstawione pochodne pirenu **A1–A5** wykazywały przeważnie jedno szerokie maksimum emisji z niewielkimi ramionami w każdym z badanych rozpuszczalników. Jednakże widma emisji związku tetrapodstawionego **A6** wykazały strukturę wibracyjną z trzema maksimumami we wszystkich rozpuszczalnikach, przypominającą sam piren, ale przesuniętą w stronę dłuższych fal o około 30 nm w stosunku do pirenu. Co więcej, główne maksimum emisji dla związku **A6** było przesunięta o około 20 nm w kierunku większej energii w porównaniu z innymi związkami **A1–A5**, chociaż jego ramię przy około 440 nm odpowiadało maksimum obserwowanemu w innych pochodnych pirenu. Jest to zachowanie bardzo niestandardowe, gdyż 1,3,6,8-tetrapodstawione pochodne pirenu, w porównaniu z ich mono- i dipodstawionymi analogami, wykazują przesunięte w stronę dłuższych fal maksima emisji związane ze zwiększoną koniugacją π co wynika z dodatkowych podstawników w rdzeniu pirenu. Kompleksowa analiza widm absorpcyjnych i emisyjnych pochodnych pirenu w rozpuszczalnikach o różnej polarności wykazała, że na intensywność fluorescencji ma wpływ polarność rozpuszczalnika, przy czym **A6** wykazywał ograniczoną czułość na polarność rozpuszczalnika. Ponadto wydajność kwantowa fluorescencji maleje wraz ze wzrostem liczby podstawników antracenyłowych i ze wzrostem polarności rozpuszczalnika, i jest najniższa dla tetrapodstawionego pirenu **A6**, który wykazuje podobną wydajność kwantową około 45% we wszystkich rozpuszczalnikach. Te obserwacje są również przeciwne do zmian wydajności kwantowych fluorescencji związków **1–4** opisanych w pracy [H2], gdzie wydajność kwantowa fluorescencji rosła wraz ze zwiększającą się ilością podstawników. Widma emisji zarejestrowane w proszku wykazały przesunięcie w stronę fal dłuższych, przy czym **A1** wykazywał najwyższą wydajność kwantową fluorescencji, a związek **A6** w cieple stałym wykazuje najbardziej batochromowe przesunięcie. Z kolei widma emisji zmierzone w niskiej temperaturze (77 K) wykazywały przesunięcia w stronę dłuższych fal oraz zaobserwowano dłuższe czasy zaniku fluorescencji. Badania spektroskopowe w mieszaninach THF/woda wykazały tłumienie luminescencji przy większych udziałach wody.

[H4] W pracy **[H4]** rozszerzono badanie wpływu pozycji podstawienia i liczby podstawników na właściwości fotofizyczne o 1,7-dipodstawioną pochodną, czyli taką która zawiera podstawnik zarówno w obszarze non-K jak i pozycji węzłowej. Co ważne, dokonano również analizy 1,3,6-tripodstawionego pirenu. Badania zrealizowano na przykładzie pirenu podstawionego pirazolem, gdzie podstawnik przyłączony jest do pirenu wiązaniem węgiel-azot, struktury związków **P1–P8** przedstawiono na Rysunku 9.



Rysunek 9. Mono-, di-, tri- i tetra- pochodne pirenu zawierające grupy pirazolylowe.

Wszystkie cząsteczki docelowe **P1–P8** zostały otrzymane poprzez bezpośrednią reakcję kondensacji odpowiedniego bromopirenu z dostępnym handlowo pirazolem w obecności węglanu cezu i jodku miedzi(I) w roztworze DMF. Analiza właściwości fotofizycznych (przykładowe dane przedstawione są na Rysunku 10 i w Tabeli 4), jak również odniesienie tych wyników do obliczeń kwantowo-chemicznych, wykazała, że związki z większą liczbą podstawników ogólnie wykazują lepszą stabilność termiczną i wydajność kwantową fluorescencji. Warto zauważyć, że otrzymane cząsteczki dobrze rozpuszczają się w różnych rozpuszczalnikach organicznych. Niemniej jednak dipodstawione pochodne zawierające grupę pirazolylową w pozycji węzłowej (**P5** i **P6**) wykazywały zauważalnie niższą rozpuszczalność. Związek **P6**, który jest podstawiony w dwóch regionach – non-K i pozycja węzłowa, wykazywał najniższą rozpuszczalność spośród badanej grupy związków. W kwestii właściwości fotofizycznych akceptorowy charakter podstawnika wywoływał zbieżne obserwacje do tych, które już opisano dla układów piren-triazol, omówionych w pracy **[H2]**.



Rysunek 10. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (DCM), (c) znormalizowane widma emisji w proszku pochodnych pirenu **P1–P8**.

Tabela 4. Właściwości fotofizyczne w cieczy (DCM, $c = 10^{-5}$ mol/L) oraz w proszku pochodnych pirenu **P1–P8**.

		λ_{abs} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
P1	DCM	245, 269, 279, 343	423 ^{sh} , 404, 384	26	22.0981	3.23
	proszek	-	469	33	105.79	-
		270, 278,			26.6258	
P2	DCM	310, 324, 340	431 ^{sh} , 411, 400 ^{sh} , 390	17	3.2820 (3.21), 27.4000 (96.79)	3.18
	proszek	-	483, 504	17	449.98	-
		245, 262,			12.3816	
P3	DCM	271, 283, 352	411 ^{sh} , 393	43	5.0831 (12.29), 13.4043 (87.71)	3.18
	proszek	-	487	1	79.76	-
		248, 262,			12.2358	
P4	DCM	270, 283, 340, 356	410 ^{sh} , 393	44	4.6987 (8.07), 12.9822 (91.93)	3.16
	proszek	-	502	3	135.01	-

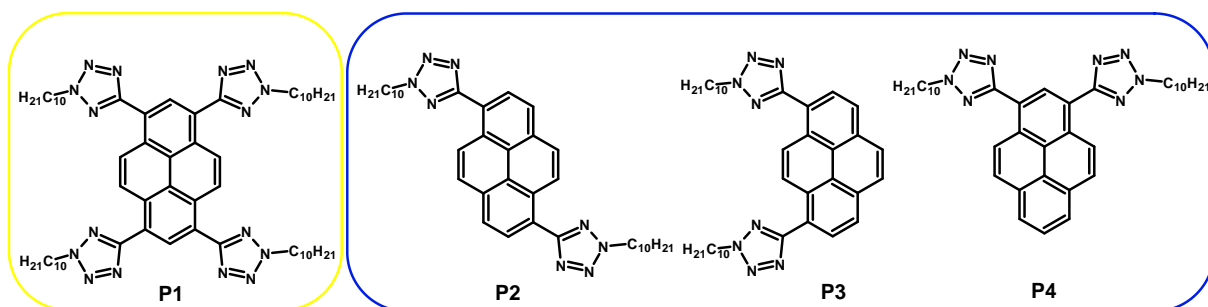
P5	DCM	294, 313, 326, 341	452 ^{sh} , 427, 415 ^{sh} , 405	45	29.7200	3.06
	proszek	-	483	9	453.91	-
					10.7705	
P6	DCM	285, 343, 353	421 ^{sh} , 402	56	6.5170 (73.27), 22.4300 (26.73)	3.09
	proszek	-	490	7	198.01	-
					6.4392	
P7	DCM	250, 289, 361	419 ^{sh} , 403	76	2.3853 (6.89), 6.7392 (93.11)	3.08
	proszek	-	520	5	130.02	-
					3.7926	
P8	DCM	270, 291, 372, 377	438 ^{sh} , 413	69	3.2432 (89.22), 8.3393 (10.78)	3.00
	proszek	-	540	6	99.79	-

Jedną z istotnych obserwacji płynących z przeprowadzonych badań w ramach pracy [H4] jest znaczące podobieństwo właściwości związków 1,3,6-tripodstawionego **P7** i 1,3,6,8-tetrapodstawionego **P8**. Choć różnią się one jedynie jednym podstawnikiem, związek **P7** wykazał większą intensywność emisji oraz wyższą wydajność kwantową fluorescencji (aż o 7% w DCM) oraz dłuższy efektywny czas życia fluorescencji. Te wyniki sugerują potrzebę dalszych badań nad stosunkowo niezbadanymi 1,3,6-tripodstawionymi pochodnymi pirenu.

[H5] Wśród omawianych dipodstawionych pochodnych pirenu w ramach prac [H1-H4] przedstawiono izomery 1,6-; 1,8-; 2,7- oraz 1,7-, podczas gdy zarówno brak możliwości syntezy 1,3-dibromopirenu, opisany w pracy [H1], a co z tym związane brak również możliwości otrzymania 1,3-dipodstawionych pirenów, spowodowały, że obszar dipodstawionych pirenów w obszarze non-K stał się przedmiotem głębszych rozważań w ramach pracy przeglądowej [H5]. W ramach pracy przeglądowej przedstawiono wszystkie opisane w literaturze podejścia do syntezy dipodstawionych pirenów. W artykule przedstawiono sposoby otrzymywania dipodstawionych półproduktów w oparciu o reakcje bromowania i acylowania. Ma to kluczowe znaczenie przy określeniu możliwości dalszej funkcjonalizacji poprzez zastosowanie reakcji sprzęgania, cykloaddycji, kondensacji itp. Ponadto dokonano przeglądu zastosowania dipodstawionych pirenów w syntezie 1,3,6,8-tetrapodstawionych pochodnych pirenu. Przegląd 1,3-, 1,6- i 1,8-dipodstawionych pirenów grupami (hetero)arylowymi oraz metod ich syntezy wykazał, że liczba znanych 1,6-dipodstawionych pochodnych jest największa, a głównym powodem zainteresowania tymi związkami są ich właściwości optyczne i fotofizyczne, które czynią je potencjalnymi materiałami dla szeroko rozumianej elektroniki organicznej. Szerokie możliwości

otrzymywania 1,6- i 1,8-dibromopirenu, w odróżnieniu od 1,3-dibromopirenu, pokazały, że w przypadku izomeru 1,3- należy stosować zdecydowanie inne podejście, jak np. acylowanie, które umożliwia otrzymanie mieszaniny izomerów 1,3-, 1,6- i 1,8-, które z powodzeniem można stosować w reakcjach kondensacji, a następnie wydzielać poszczególne izomery. Inne podejście przedstawione na przykładzie 1,3-difenylo-7-*tert*-butylopirenu opiera się na zastosowaniu Nafionu-H, który pozwala na usunięcie grupy zabezpieczającej w pozycji 7 – *tert*-butylu. Warto w tym miejscu dodać, że w ramach prowadzonych badań, takie podejście zostało sprawdzone przez Habilitanta na przykładzie innych układów, np. takich które zawierały w pozycjach 1 i 3 podstawione triazole. Niestety w żadnym przypadku nie udało się usunąć z pozycji 7 zabezpieczającej grupy *tert*-butylowej.

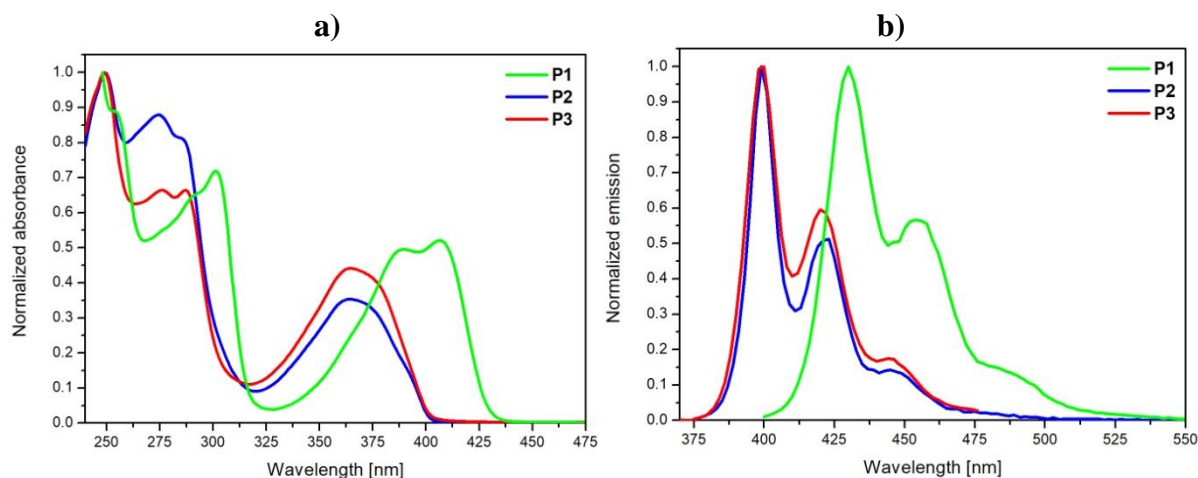
[H6] Pomimo mozolnej pracy eksperymentalnej otrzymanie a następnie zbadanie 1,3-dipodstawionych pochodnych pirenu okazało się praktycznie niemożliwe, a zrozumienie właściwości struktur tego typu na podstawie już wspomnianych opisanych w literaturze trzech związków jest niewystarczające. W związku z tym w ramach pracy **[H6]** przedstawiono obliczenia teoretyczne oparte na metodzie DFT dla 1,3,6,8-tetrapodstawionego pirenu (**P1**) oraz 1,6- i 1,8-dipodstawionych pirenów (**P2** i **P3**) które skonfrontowano z danymi eksperymentalnymi otrzymanymi dla uprzednio zsyntezowanych w wyniku reakcji cykloaddycji 1,3-dipolarnej pochodnych **P1–P3**, zawierających motyw tetrazolowy z łańcuchem butylowym (Rysunek 11). Odniesienie wyników eksperymentalnych do wyników obliczeń kwantowo-chemicznych pozwoliło na znalezienie optymalnych parametrów obliczeń, co jest niezbędne do uzyskania rozsądnych wyników obliczeń dla 1,3-dipodstawionego pirenu **P4**.



Rysunek 11. 1,3,6,8-Tetrapodstawiony piren oraz 1,6-; 1,8- oraz 1,3-dipodstawione analogi zawierające grupy 2-butyl-2*H*-1,2,3,4-tetrazolylowe **P1–P4**.

Maksima emisji zarówno dipodstawionych pochodnych pirenu **P2** i **P3** są identyczne, natomiast maksima emisji tetrapodstawionego **P1** są przesunięte o 30 nm w kierunku dłuższych fal. Dipodstawione pireny **P2** i **P3** wykazują dwukrotnie dłuższe wartości efektywnego czasu

zaniku fluorescencji w porównaniu z tetrapodstawionym **P1**. Wydajność kwantowa fluorescencji dla **P1–P3** mieści się w zakresie 82-91%, ale wartość największa osiągnięta została przez związek 1,6-dipodstawiony **P2** (Rysunek 12, Tabela 5).



Rysunek 12. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (CHCl_3 , $c = 10^{-5}$ mol/L) pochodnych pirenu **P1–P3**.

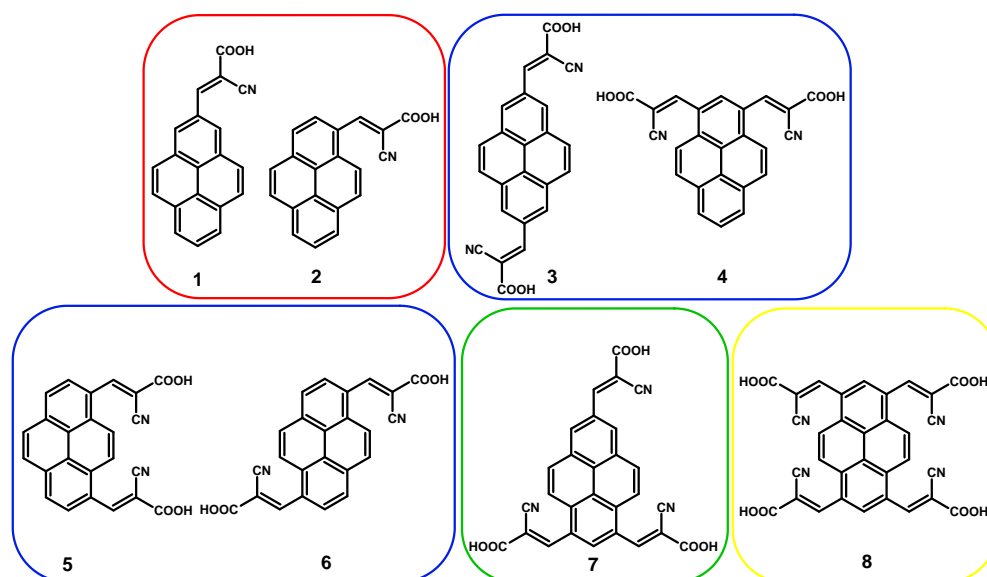
Tabela 5. Właściwości fotofizyczne w cieczy (CHCl_3 , $c = 10^{-5}$ mol/L) pochodnych pirenu **P1–P3**.

	λ_{abs} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
				1.84	
P1	254, 304, 386	430, 454	82	0.02 (17.37) 2.22 (82.63)	2.88
				3.59	
P2	252, 288, 362	399, 423, 445	91	1.27 (1.69) 3.63 (98.31)	2.88
P3	252, 286, 366	400, 420, 444	83	4.13	3.08

Interpretacja wyników eksperymentalnych została przeprowadzona w oparciu o wyniki obliczeń teoretycznych z wykorzystaniem metody DFT. Przetestowano różne funkcjonały korelacyjno-wymienne: B3LYP, CAM-B3LYP, wB97XD i M06. Porównanie optycznych przerw energetycznych z wartościami teoretycznymi pokazało, że funkcjonał B3LYP zapewnia najbardziej rozsądne wyniki teoretyczne, z różnicami do 0.24 eV. Udział podstawników tetrazolowych w tworzeniu orbitali HOMO i LUMO jest najwyższy w przypadku tetrapodstawionego pirenu **P1**. Kąty pomiędzy pirenem a podstawnikami są największe dla tetrapodstawionego pirenu **P1**, kolejno dla 1,3-dipodstawionej pochodnej pirenu **P4**, a następnie **P2**, podczas gdy izomer 1,8 jest prawie płaski. Dane dotyczące momentów dipolowych wykazały, że **P1** wykazuje najniższe zmiany momentu dipolowego pomiędzy

stanem podstawowym singletowym a wzbudzonym trypletowym ($\Delta\mu$), natomiast dipodstawione pireny **P2–P4** mają porównywalne wartości $\Delta\mu$. Obliczone widma absorpcyjne wykazały, że potencjały korelacyjno-wymienne: CAM-B3LYP, wB97XD i M06 skutkują racjonalnym opisem przejść $S_0 \rightarrow S_1$ i $S_0 \rightarrow S_2$, ale nie obejmują przejścia $S_0 \rightarrow S_3$. W przeciwieństwie do potencjału B3LYP, który opisuje trzy przejścia (z przesunięciem o około 40 nm). Maksima emisji uzyskane z obliczeń TD-DFT z potencjałem CAM-B3LYP są najbardziej wiarygodne, z niewielką różnicą w stosunku do widm eksperymentalnych. Uzyskane rozsądne wyniki teoretyczne dla pochodnych 1,3,6,8-, 1,6- i 1,8- pozwoliły uzyskać dane dotyczące właściwości fotofizycznych pirenu 1,3-dipodstawionego. Wyniki te wskazują, że wzór podstawienia dipodstawionych pirenów w obszarze non-K nie wpływa w znaczący sposób na właściwościach cząsteczek. Można zatem wnioskować w tym momencie, że 1,3-dipodstawione pireny jako same w sobie nie są warte żmudnej pracy laboratoryjnej nad ich syntezą, gdyż nie wykazują one potencjalnie innych właściwości optycznych w porównaniu do swoich analogów 1,6- i 1,8-.

[H7] Wpływ liczby i sposobu podstawienia pirenu został omówiony również w ramach pracy **[H7]**, w której to, po raz pierwszy, zaprezentowano obliczenia kwantowo-chemiczne dla cząsteczek zawierających od 1 do 4 grup kotwiczących a następnie modelowano produkty chemisorpcji tych molekuł na klastrach $(\text{TiO}_2)_9$, gdzie chemisorpcja zachodziła do jednej lub więcej grup kotwiczących. Modelowanie pozwoliło na określenie wpływu liczby grup kotwiczących i sposobu podstawień na efektywność barwników opartych na pirenach w ogniwach słonecznych uczulanych barwnikiem (DSSC). Analizie poddano pochodne pirenu podstawione w obszarze non-K, jak również w pozycjach węzłowych, obejmując izomery mono- i dipodstawione pirenów, a także pochodne 1,3,7-tripodstawione i 1,3,6,8-tetrapodstawione (Rysunek 13).



Rysunek 13. Mono-, di-, tri- i tetra- pochodne pirenu zawierające grupy kotwiczące **1–8**.

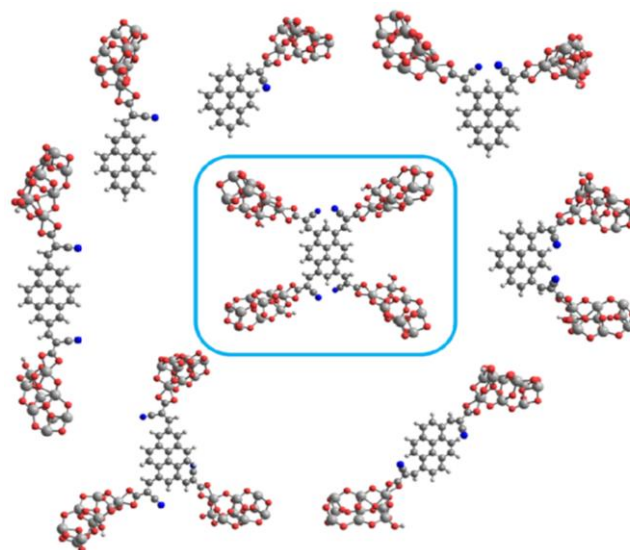
Wyniki pokazują, że liczba i położenie grup kotwiczących mają istotny wpływ na właściwości absorpcyjne i transfer elektronów, a w konsekwencji na ogólną wydajność konwersji ogniw słonecznych uczulanych barwnikiem (Tabela 6).

Tabela 6. Obliczone parametry fotofizyczne dla pochodnych pirenu **1–8**.

	1	2	3	4	5	6	7	8
E_{dye} [eV]	5.75	5.74	5.98	5.94	5.93	5.99	6.22	6.34
$E_{\lambda max}$ [eV]	3.26	3.22	3.12	3.12	3.09	3.10	3.21	2.81
E^*_{dye} [eV]	2.49	2.52	2.86	2.82	2.84	2.89	3.01	3.53
ΔG_{inject} [eV]	1.51	1.48	1.14	1.18	1.16	1.11	0.99	0.47
ΔG_{reg} [eV]	1.15	1.14	1.38	1.34	1.33	1.39	1.62	1.74
V_{oc} [V]	1.45	1.44	1.68	1.64	1.63	1.69	1.92	2.04
μ_{normal} [D]	7.40	10.01	12.74	15.06	12.89	13.68	5.87	3.31
λ_{max} [nm]	379.95	384.65	397.44	397.50	400.79	399.50	386.23	441.60
f	0.0449	0.5743	0.0575	0.9857	0.6096	0.8432	1.1531	1.5068
LHE	0.0982	0.7335	0.1240	0.8966	0.7543	0.8565	0.9297	0.9689

Z obliczeń wynika, że zastosowanie pochodnych pirenu posiadających wiele grup kotwiczących może potencjalnie zwiększyć efektywność i stabilność DSSC. Ze względu na wąską przerwę energetyczną, szerokie widmo absorpcji i wysoki moment dipolowy, wraz ze wzrostem liczby grup kotwiczących i klastrów (TiO₂)_n, badane pochodne są obiecującymi kandydatami jako barwniki do ogniw słonecznych (Rysunek 14). Wartości LHE sugerują, że barwniki **1** i **3** mogą nie generować prądu, podczas gdy barwniki **2**,

5, 7 i 8 charakteryzują się wysokimi parametrami LHE, przy czym barwnik 8 uzyskał najwyższą wartość.

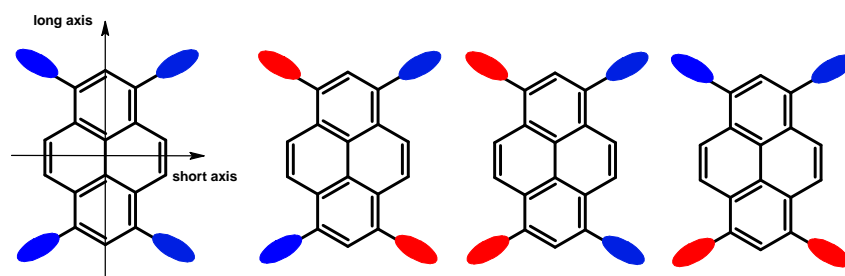


Rysunek 14. Chemisorpcja pochodnych pirenu 1–8 do klastrów $(TiO_2)_9$ z udziałem wszystkich grup kotwiczących.

Stosowanie wielu grup kotwiących może poprawić stabilność i skuteczność transferu ładunku, a wprowadzone modyfikacje przyczyniły się do zwiększenia wydajności DSSC. Te wyniki sugerują potrzebę dalszego badania i optymalizacji barwników opartych na pireninie, podstawionym w szczególności w obszarze non-K, w celu uzyskania wydajnych DSSC.

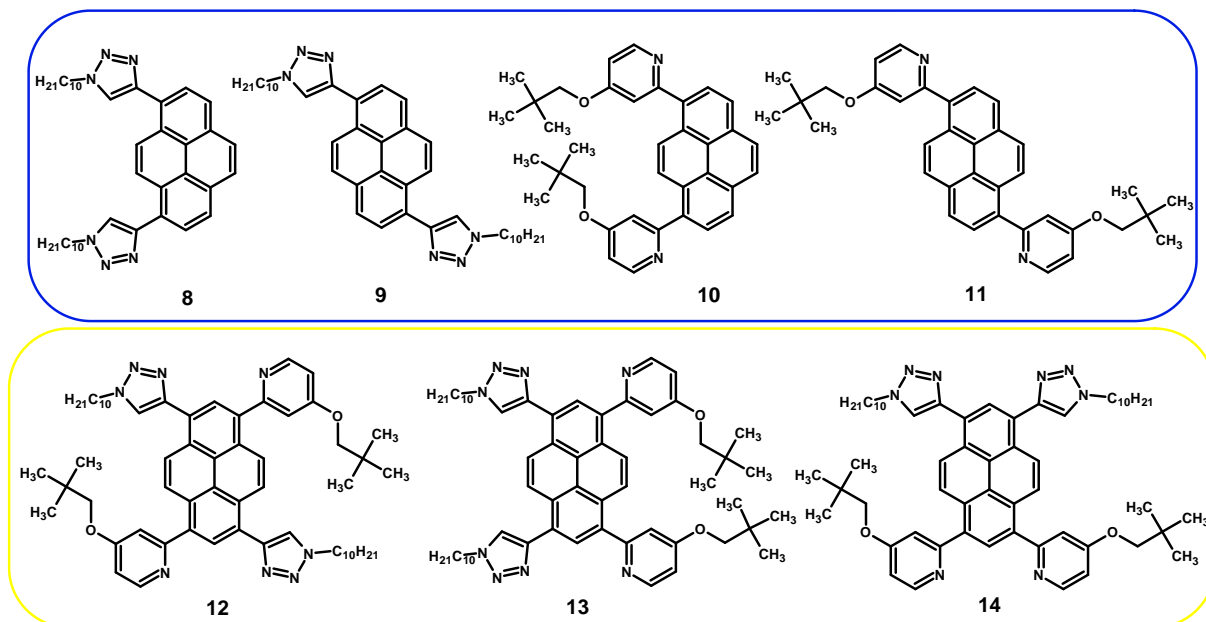
4.3. 1,3,6,8-Tetrapodstawione pireny z dwoma rodzajami podstawników [H8-H11]

Zdobyte doświadczenie w zakresie mono-, di-, tri- i tetrapodstawionych pirenów zawierających tylko jeden rodzaj podstawnika było inspiracją do podjęcia badań dotyczących 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów zawierających dwa rodzaje podstawników w jednej cząsteczce podstawionych w sposób symetryczny/niesymetryczny względem osi symetrii pirenu i zbadania jak zmiany strukturalne z zastosowaniem wcześniej opublikowanych typów podstawników wpływają na zmiany właściwości fotofizycznych (Rysunek 15).



Rysunek 15. 1,3,6,8-Tetrapodstawione pireny zawierające dwa rodzaje podstawników.

[H8] W ramach pracy [H8] przedstawiono opracowaną sekwencję reakcji otrzymywania pirenów podstawionych zarówno grupą 1-decyl-1*H*-1,2,3-triazolową i 4-(2,2-dimetylpropyloksy)pirydylową (Rysunek 16), gdzie punktem wyjścia był odpowiednio 1,6- lub 1,8-dibromopiren poddany kolejno reakcji sprzężenia Suzukiego-Miyaury → bromowania → sprzężenia Sonogashiry → cykloaddycji.



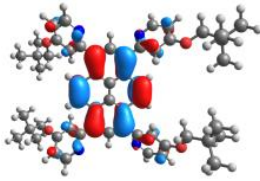
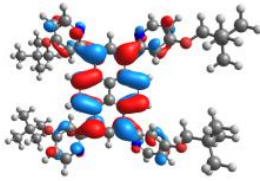
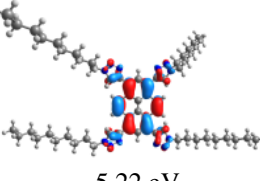
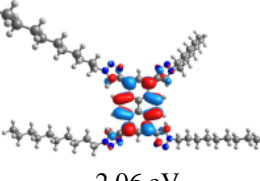
Rysunek 16. Pochodne pirenów zawierające dwa rodzaje podstawników **12–14** wraz z dipodstawionymi analogami **8–11**.

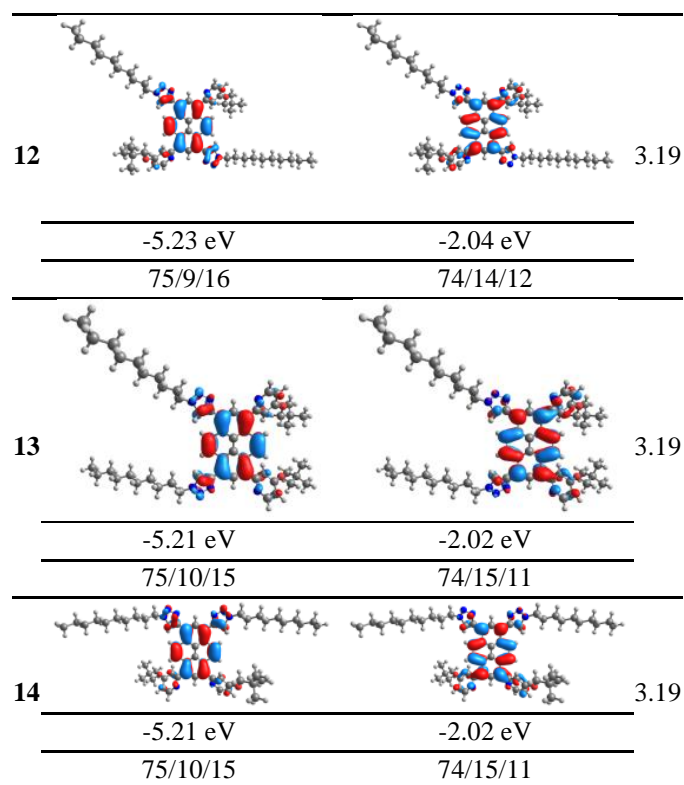
Wprowadzenie w odpowiednie pozycje pirenów dwóch różnych grup okazało się zdecydowanym wyzwaniem syntetycznym, a opracowana metodyka syntezy dla pochodnych pirenów zawierających tylko jeden rodzaj podstawnika, nie skutkowało otrzymaniem oczekiwanych struktur zawierających dwa rodzaje grup heteroarylowych. W szczególności warunki prowadzenia reakcji sprzężenia Sonogashiry wymagały zmiany, gdyż te stosowane dla 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów nie skutkowało otrzymaniem oczekiwanego produktu. Zastosowanie dodatku silnej zasady - 1,8-diazabicyklo[5.4.0]undec-7-enu (DBU) umożliwiło otrzymanie etynylowych produktów przejściowych. Warto również wspomnieć, że zmiana kolejności przedstawionej drogi syntezy na następującą: sprzężenie Sonogashiry → cykloaddycja → bromowanie → reakcja sprzężenia Suzukiego-Miyaury, skutkowało drastycznym obniżeniem wydajności otrzymywanych produktów lub też całkowitym brakiem oczekiwanego produktu.

Co kluczowe, wykonane obliczenia kwantowo-chemiczne 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów zawierających dwa rodzaje podstawników w jednej cząsteczce podstawionych

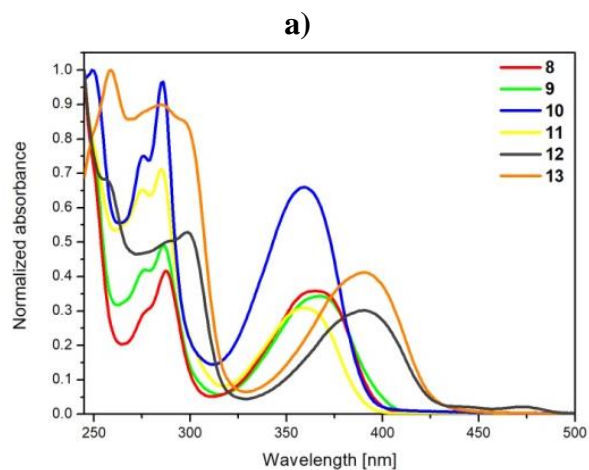
w sposób symetryczny/niesymetryczny względem osi symetrii struktury, wykazały, że sposób podstawienia pirenu przez dwie różne grupy wpływa na rozmieszczenie orbitali HOMO-1 i LUMO+1, a te z kolei determinują właściwości optyczne (Tabela 7). Dodatkowo w ramach pracy wykonano obliczenia teoretyczne dla związku, którego cząsteczka zawiera jeden rodzaj podstawnika w pozycjach 1 i 3, natomiast drugi znajduje się w pozycjach 6 i 8 (związek **14**). Zauważono, że wyznaczone kąty między podstawnikami a pirenem dla związku **14** są niższe niż w cząsteczkach **12** i **13**, co może wskazywać na potencjalnie wyższą wydajność kwantową fluorescencji. Otrzymanie tego typu podstawienia wymagałoby uprzedniej syntezy 1,3-dipodstawionego pirenu, którego otrzymanie jak już wykazano w ramach poprzednich prac, było nieosiągalne. Warto w tym miejscu nadmienić, że 29 kwietnia 2024 roku, Yosuke Niko wraz ze współpracownikami opublikowali pracę, w której zaprezentowali efektywną (wydajność całkowita 71%), wieloetapową (4 etapy) metodę syntezy 1,3-dibromopirenu z 1-metoksypirenu [32]. Niniejsze doniesienie literaturowe podkreśla fakt zainteresowania tematem 1,3-dibromopirenu jako prekursora 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów, zawierających dwa rodzaje podstawników, podstawionych symetrycznie względem długiej osi symetrii, co potwierdza domniemanie oparte na wynikach obliczeń kwantowo-chemicznych uzyskane w ramach pracy [H8].

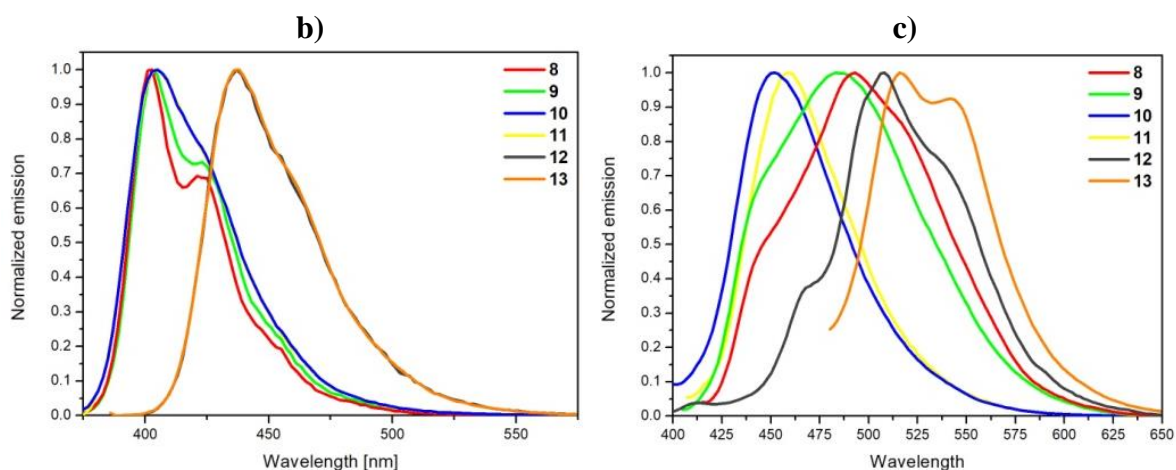
Tabela 7. Kontury orbitali granicznych, ich energie [eV], wartości przerw energetycznych ΔE oraz udział poszczególnych części związków w ich tworzeniu (piren/pirydył lub/i triazolyl) dla **P1**, **P4** oraz **12–14**.

	HOMO	LUMO	ΔE [eV]
P1			3.22
	-5.36 eV	-2.14 eV	
	54/46	52/48	
P4			3.16
	-5.22 eV	-2.06 eV	
	72/28	76/24	



Z otrzymanych pomiarów parametrów fotofizycznych przedstawionych na Rysunku 17 i 18 oraz w Tabeli 8 wynika, że wydajność kwantowa fluorescencji dla molekuł zawierających dwa rodzaje grup heteroarylowych jest do 23% większa od analogów podstawionych przez jeden rodzaj podstawnika, przy czym pochodna podstawiona w sposób symetryczny względem krótkiej osi pirenu wykazuje najwyższą wartość wydajności kwantowej fluorescencji.

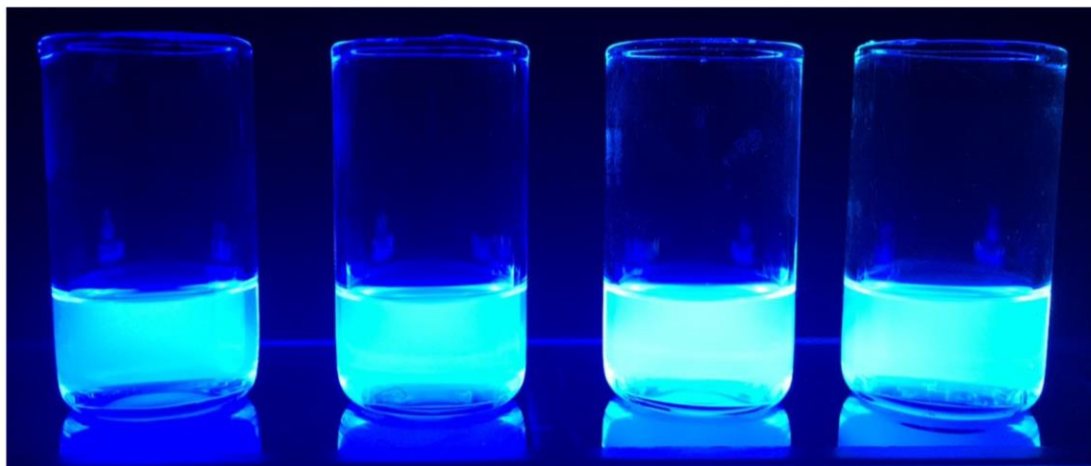
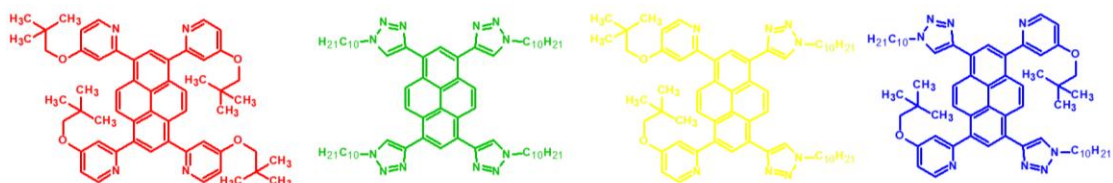




Rysunek 17. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (DCM), (c) widma emisji w proszku, pochodnych pirenu 8–13.

Tabela 8. Właściwości fotofizyczne w cieczy (DCM, $c = 10^{-5}$ mol/L) oraz w proszku pochodnych pirenu 8–13.

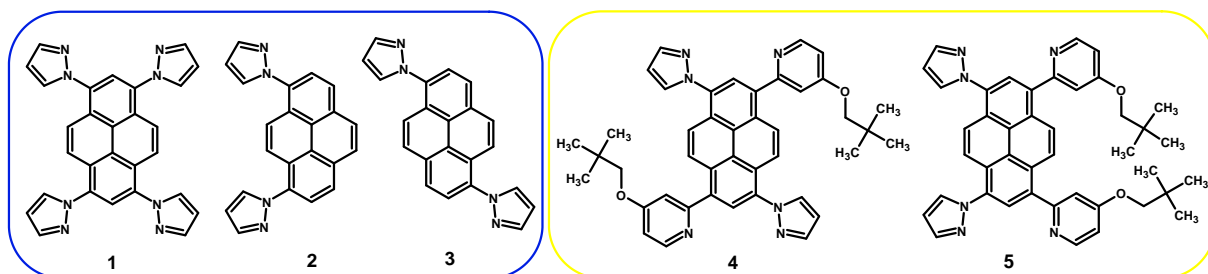
		λ_{\max} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
					3.72	
8	DCM	277, 287, 365	403, 421	63.84	0.04 (12.37) 4.24 (87.63)	3.09
	proszek	-	493	-	-	2.52
					2.37	
9	DCM	277, 286, 367	403, 423	63.37	0.03 (18.07) 2.89 (81.93)	3.08
	proszek	-	483	-	-	2.57
					1.47	
10	DCM	276, 286, 359	405	66.00	0.03 (18.50) 1.78 (87.10)	3.06
	proszek	-	452	-	-	2.74
					1.31	
11	DCM	275, 285, 359	404	64.35	0.04 (24.71) 1.73 (75.29)	3.07
	proszek	-	459	-	-	2.70
12	DCM	255, 298, 390	437	89.00	1.98	2.84
	proszek	-	508	-	-	2.44
					1.69	
13	DCM	259, 285, 297, 390	438	94.83	0.04 (19.10) 2.08 (80.90)	2.83
	proszek	-	516, 542	-	-	2.40



Rysunek 18. Luminescencja roztworów 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów zawierających jeden lub dwa rodzaje podstawników w świetle lampy UV 365 nm (DCM, $c = 10^{-5}$ mol/L).

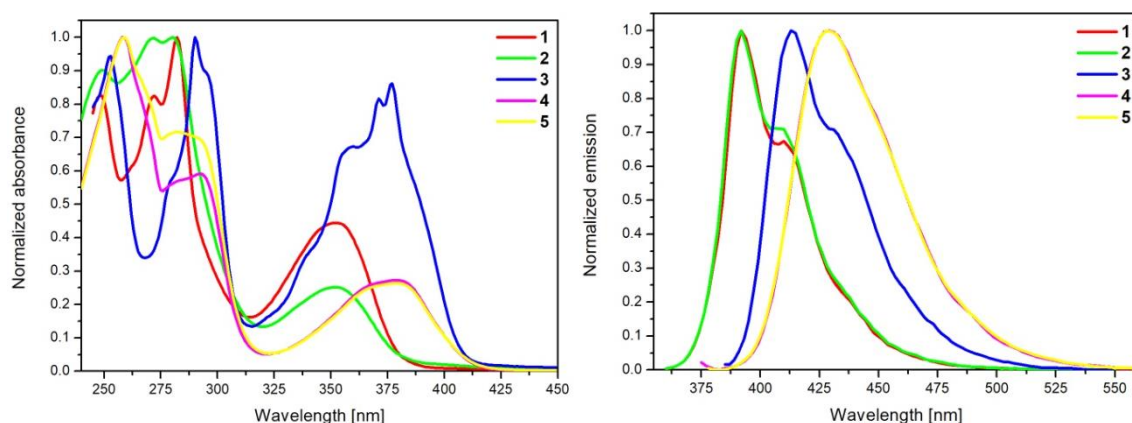
Co więcej, w pochodnej **13** podstawione grupy są skrócone względem pirenenu pod mniejszymi kątami w porównaniu do cząsteczki **12**. Zjawisko to potwierdza także obliczony moment dipolowy (μ), jak i różnica wartości momentu dipolowego stanu wzbudzonego w stosunku do stanu podstawowego, które dla **13** są zdecydowanie wyższe niż dla **12**, co jest bezpośrednio związane z symetrią **13**, co znajduje również odzwierciedlenie w wyższych intensywnościach emisji i absorpcji.

[H9] Prowadzone badania rozszerzono o kolejne pochodne zawierające dwa rodzaje grup: pirazolyłową oraz 4-(2,2-dimetylpropyloksy)piryd-2-yłową (Rysunek 19), czego wyniki zostały zaprezentowane w ramach pracy **[H9]**.



Rysunek 19. Pochodne pirenenu zawierające dwa rodzaje podstawników **4** i **5** wraz z dipodstawionymi analogami **1–3**.

Wykazano, że następująca sekwencja reakcji: sprzężanie Suzuki-Miyaura → bromowanie → kondensacja jest bardziej efektywna niż sekwencja: kondensacja → bromowanie → sprzężanie Suzuki-Miyaura. Ustalono, że wzór podstawienia nie wpływa na wartości przerw energetycznych i udział w tworzeniu orbitali granicznych, natomiast w istotny sposób modyfikuje HOMO-1 i LUMO+1, co również determinuje właściwości optyczne. Określono właściwości fotofizyczne, częściowo przedstawione na Rysunku 20 i w Tabeli 9.



Rysunek 20. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (CHCl_3 , $c = 10^{-5}$ mol/L) pochodnych pirenu **1–5**.

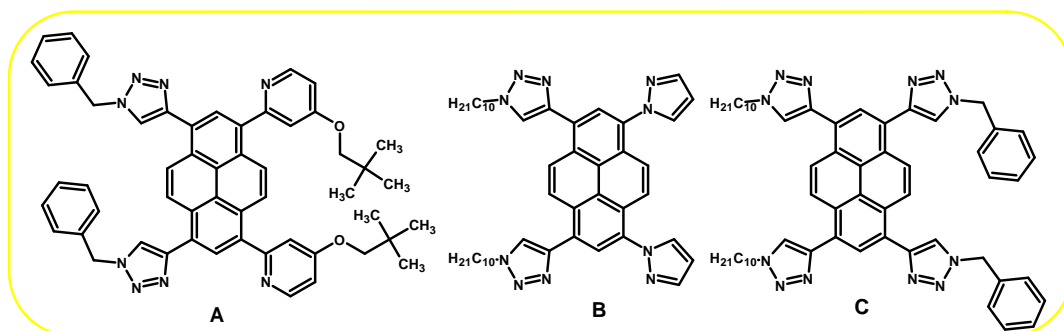
Tabela 9. Właściwości fotofizyczne w cieczy (CHCl_3 , $c = 10^{-5}$ mol/L) pochodnych pirenu **1–5**.

	λ_{abs} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
1	248, 272, 282, 353	392, 410	59	9.89 [10.41 (94.92) 0.15 (5.08)]	3.17
2	249, 272, 280, 352	392, 409	43	11.01 [11.45 (94.33) 3.76 (5.67)]	3.17
3	253, 290, 360, 371, 377	413	61	2.69 [3.04 (87.10) 0.07 (12.90)]	3.00
4	258, 292, 379	429	88	2.19	2.89
5	259, 282, 379	428	89	2.18 [2.28 (94.95) 0.33 (5.05)]	2.90

Z uzyskanych danych wynika, że wydajność kwantowa fluorescencji badanych związków silnie zależy od sposobu podstawienia pirenu. Największą wartość uzyskano dla tetrapodstawionego pirenu, w którym grupy podstawiono w sposób symetryczny w stosunku do krótkiej osi symetrii. Co ważne, wartości wydajności kwantowych fluorescencji

związków zawierających dwa rodzaje podstawników są znacznie wyższe niż 1,3,6,8-tetrapodstawione pochodne zawierające tylko jeden rodzaj podstawnika. Nie obserwuje się znaczących różnic w wartościach czasu zaniku fluorescencji pomiędzy tetrapodstawionymi pirenami, jednak porównanie ich z dipodstawionymi analogami wykazało wartości aż pięciokrotnie niższe. Przedstawione obserwacje są zbieżne z tymi, które opisano dla pochodnych pirenu w pracy [H8].

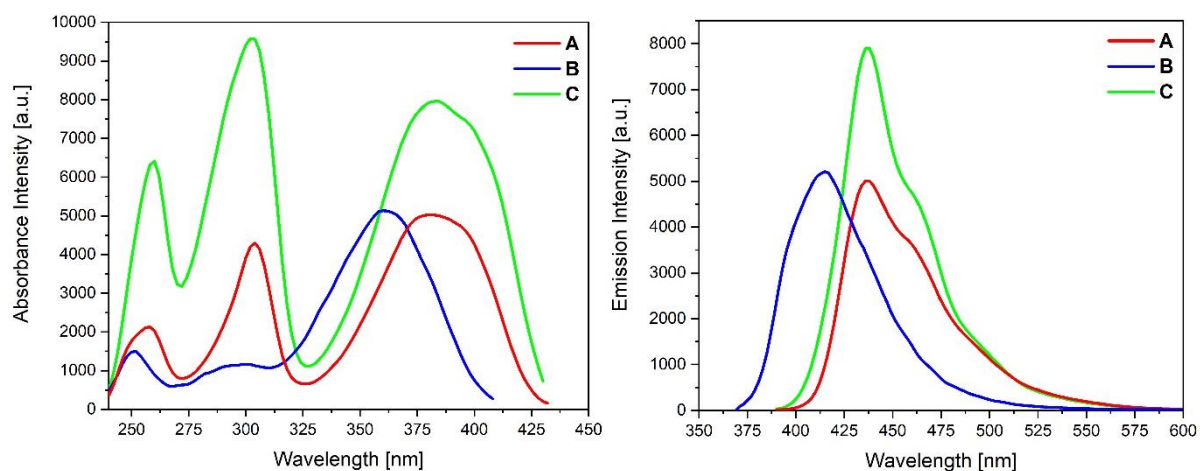
[H10] Biorąc pod uwagę fakt, że podstawienie pirenu dwoma rodzajami grup heteroarylowych w sposób symetryczny względem krótkiej osi symetrii skutkuje otrzymaniem związków, które charakteryzują się najlepszymi parametrami fotofizycznymi wśród badanych pochodnych pirenu, w ramach kolejnej pracy [H10] zsyntezowano i zbadano kolejne dwa układy zawierające podstawniki 1,2,3-triazolytowe i pirydylowe lub pirazolytowe. Sprawdzone również jak zmieniają się właściwości fotofizyczne w strukturze, w której zastosowano ten sam motyw – 1,2,3-triazol, aczkolwiek podstawiony różnymi alkilami: decylem lub benzylem (Rysunek 21). Uzyskane wyniki porównano z analogami podstawionymi w pozycjach 1,3,6,8 jednym rodzajem podstawnika, a także ze wszystkimi opisanymi w literaturze 1,3,6,8-tetrapodstawionymi pirenami podstawionymi dwoma rodzajami grup z tym samym wzorem podstawienia.



Rysunek 21. Pochodne pirenu **A–C** zawierające dwa rodzaje grup, podstawionych w sposób symetryczny względem krótkiej osi symetrii.

Stabilność termiczna badanych cząsteczek **A–C** wykazała, że zmierzone temperatury 5% i 10% ubytku masy podczas ogrzewania wpasowywały się w przedział wartości osiągniętych przez pirenny podstawione tylko jednym rodzajem podstawnika. Biorąc pod uwagę obserwacje właściwości termicznych badanych związków, ustalono, że przewidywanie stabilności termicznej dipodstawionych i tetrapodstawionych pirenów z jednym lub dwoma rodzajami grup jest niemożliwe, ponieważ właściwość ta silnie zależy od charakteru podstawników, nie obserwuje się jednej tendencji zmian.

Właściwości fotofizyczne dla molekuł **A–C** przedstawione na Rysunku 22 i w Tabeli 10, uwidocznily, że związki **A** i **C**, które zawierały podstawnik 1-benzylo-1,2,3-triazolytowy, wykazywały zarówno maksima absorpcji i emisji przy tej samej długości fali.



Rysunek 22. (a) Widma absorpcji, (b) widma emisji w cieczy (CHCl_3 , $c = 10^{-5}$ mol/L) pochodnych pirenu **A–C**.

Tabela 10. Właściwości fotofizyczne w cieczy (CHCl_3 , $c = 10^{-5}$ mol/L) pochodnych pirenu **A–C**.

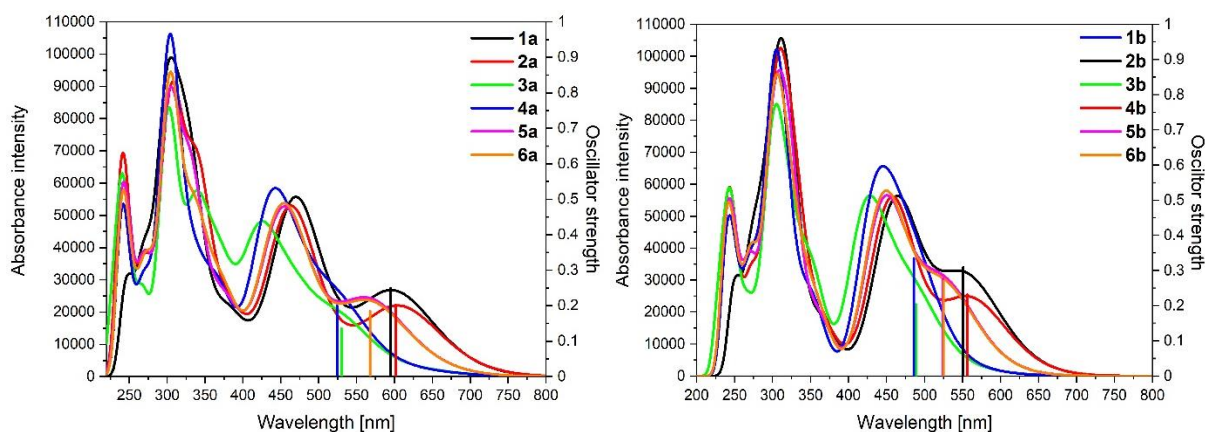
	λ_{abs} [nm]	PL λ_{em} [nm]	Φ [%]	τ [ns] (udział %)	$E_{\text{g opt}}$ [eV]
1.67					
A	258, 301, 392	436	79	0.05 (18.19) 2.03 (81.81)	2.84
2.83					
B	266, 279, 360	415	71	1.42 (27.19) 3.35 (72.81)	2.99
1.74					
C	257, 298, 391	436	81	0.02 (14.57) 2.03 (85.43)	2.84

Chociaż wszystkie pochodne pirenu **A–C** zostały podstawione symetrycznie, to symetria w przypadku związków **A** i **C** była silnie zaburzona przez ułożenie łańcuchów alkilowych, powodując znaczne przesunięcie maksimów emisji w kierunku dłuższych fal w porównaniu ze związkiem **B** ze zniekształconą symetrią przez alkilowy łańcuch decylowy w jednostkach triazolu w pozycjach 1 i 8. Wydajność kwantowa fluorescencji dla związków **A** i **C** była bardzo podobna i około 10% wyższa niż dla związku **B**. Właściwości fotofizyczne tetrapodstawionych pochodnych pirenu, posiadających jednostki triazolyłowe w pozycjach 1 i 8 oraz identyczne podstawniki w pozycjach 3 i 6, wykazały dominację jednostek triazolowych w szkielecie

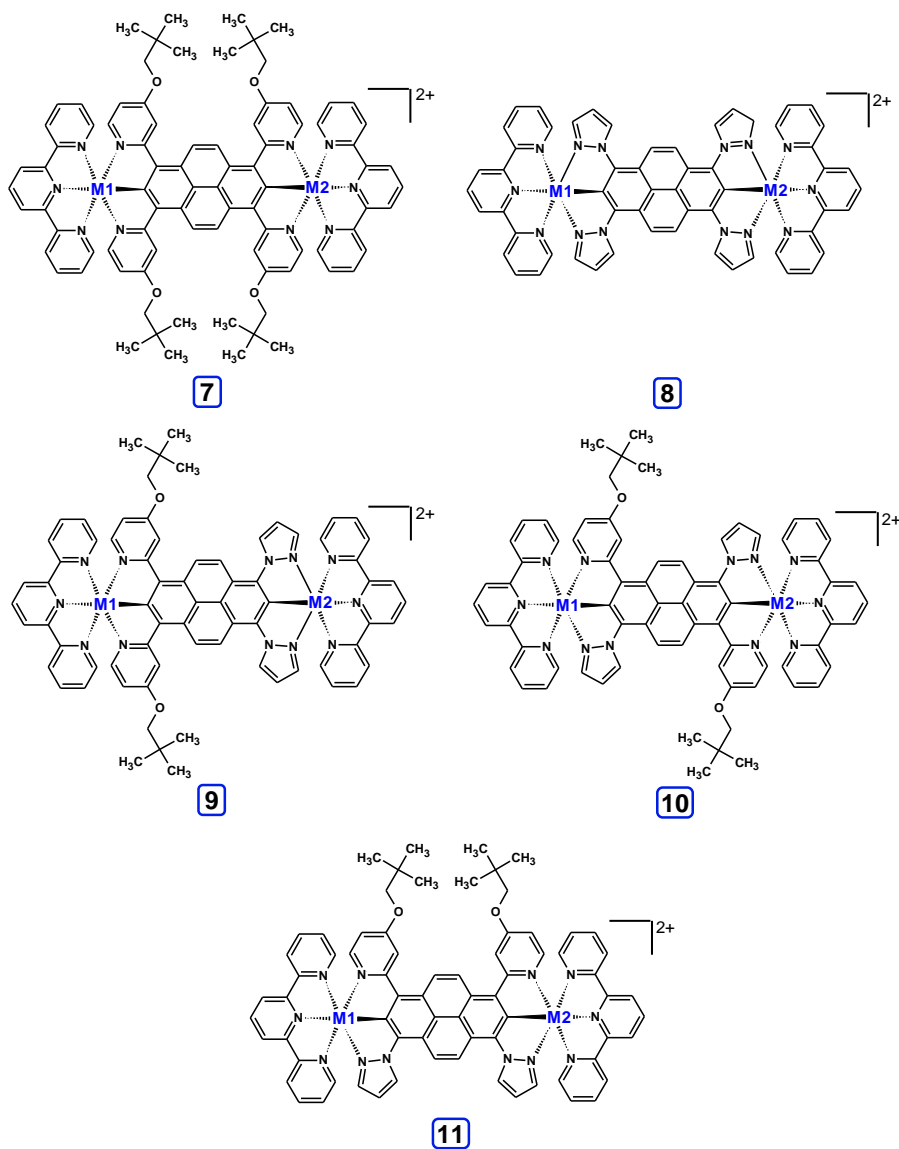
pirenowym; ta dominacja była jeszcze większa po podstawieniu pozycji 1, 3, 6 i 8 triazolami zawierającymi dwa różne alkile. Wyniki te podkreśliły zasadniczą rolę podstawienia tego typu, poprzez wydłużanie koniugacji cząsteczki, prowadząc do znaczących zmian właściwości fotofizycznych, a które można osiągnąć w oparciu o zmianę łańcuchów alkilowych w podstawnikach triazolowych w reakcji 1,3-dipolarnej cykloaddycji.

[H11] Potencjalnym zastosowaniem zaprojektowanych i otrzymanych związków będących 1,3,6,8-tetrapodstawionymi pochodnymi pirenu omawianymi w ramach prac **[H8]**, **[H9]** oraz **[H10]** jest wykorzystanie ich jako ligandy NCN-cyklometalujące. Analizując literaturę można zauważyć, że na przestrzeni ostatnich lat w kręgu zainteresowań naukowców znajdują się kompleksy z ligandami cyklometalującymi, jedno- i dwurdzeniowe, dedykowane do zastosowania w optoelektronice. W związku z tym w ramach pracy **[H11]** przedstawiono rozważania teoretyczne w oparciu o obliczenia kwantowo-chemiczne metodą DFT, jednordzeniowych jak również homo- i heterometalicznych dwurdzeniowych związków koordynacyjnych osmu i/lub rutenu z NCN-cyklometalującymi ligandami mostkującymi podstawionymi przez jeden lub dwa rodzaje grup heteroarylowych: pirazolyl i 4-(2,2-dimetylopropyloksy)piryd-2-yl w sposób zapewniający symetrię względem krótkiej lub długiej osi symetrii lub asymetrię osiową.

Wykonane obliczenia, krok po kroku poczynawszy od jednordzeniowych związków koordynacyjnych **1–6** (Rysunek 23), następnie homo- **7–11** (Rysunek 25) i heterometalicznych **12–17** dwujądrowych związków koordynacyjnych osmu lub rutenu (Rysunek 26) były kluczowe dla zrozumienia i sprawdzenia zasadności podjęcia ewentualnych badań eksperymentalnych w badanej grupie molekuł.



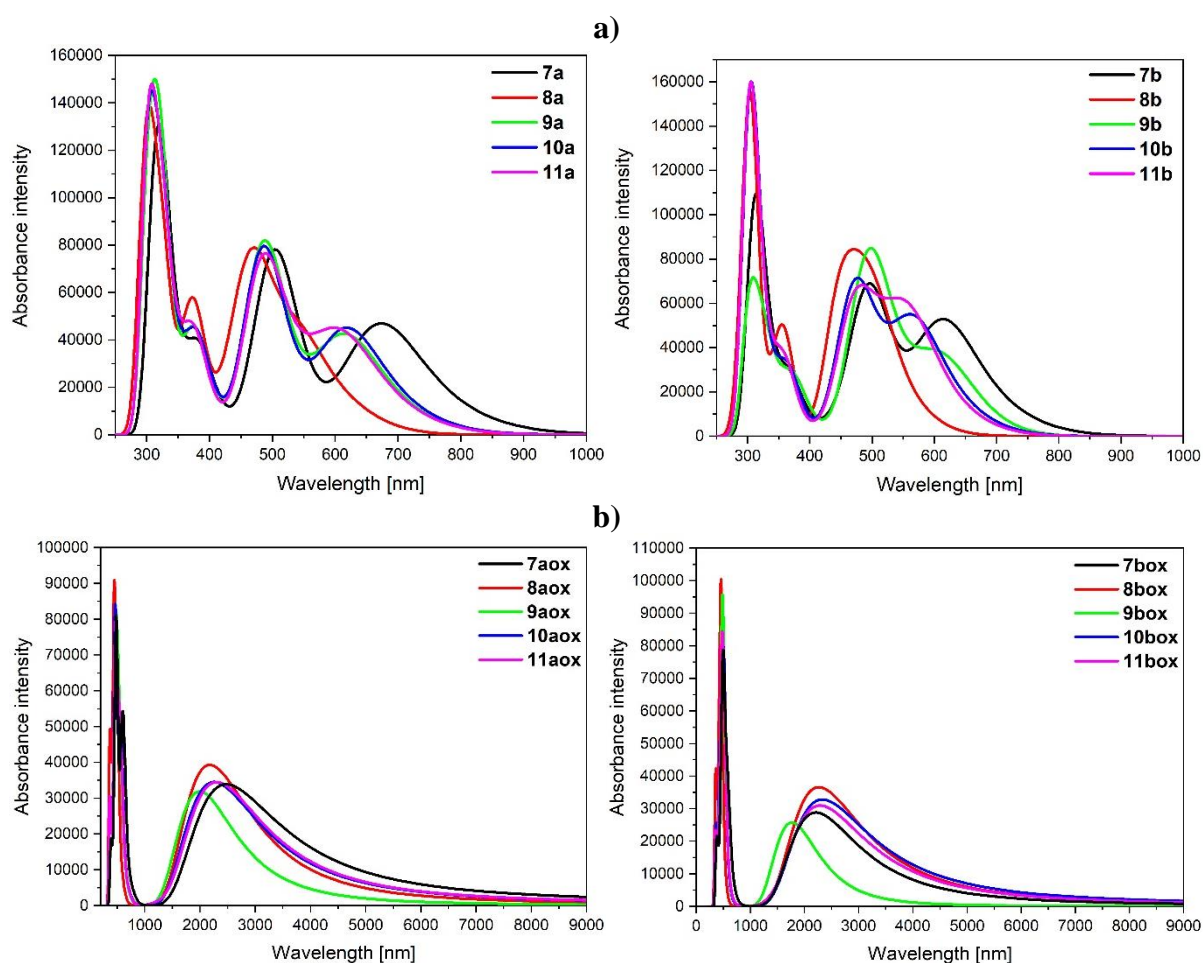
Rysunek 24. Widma teoretyczne jednordzeniowych związków koordynacyjnych osmu **1a–6a** lub rutenu **1b–6b**.



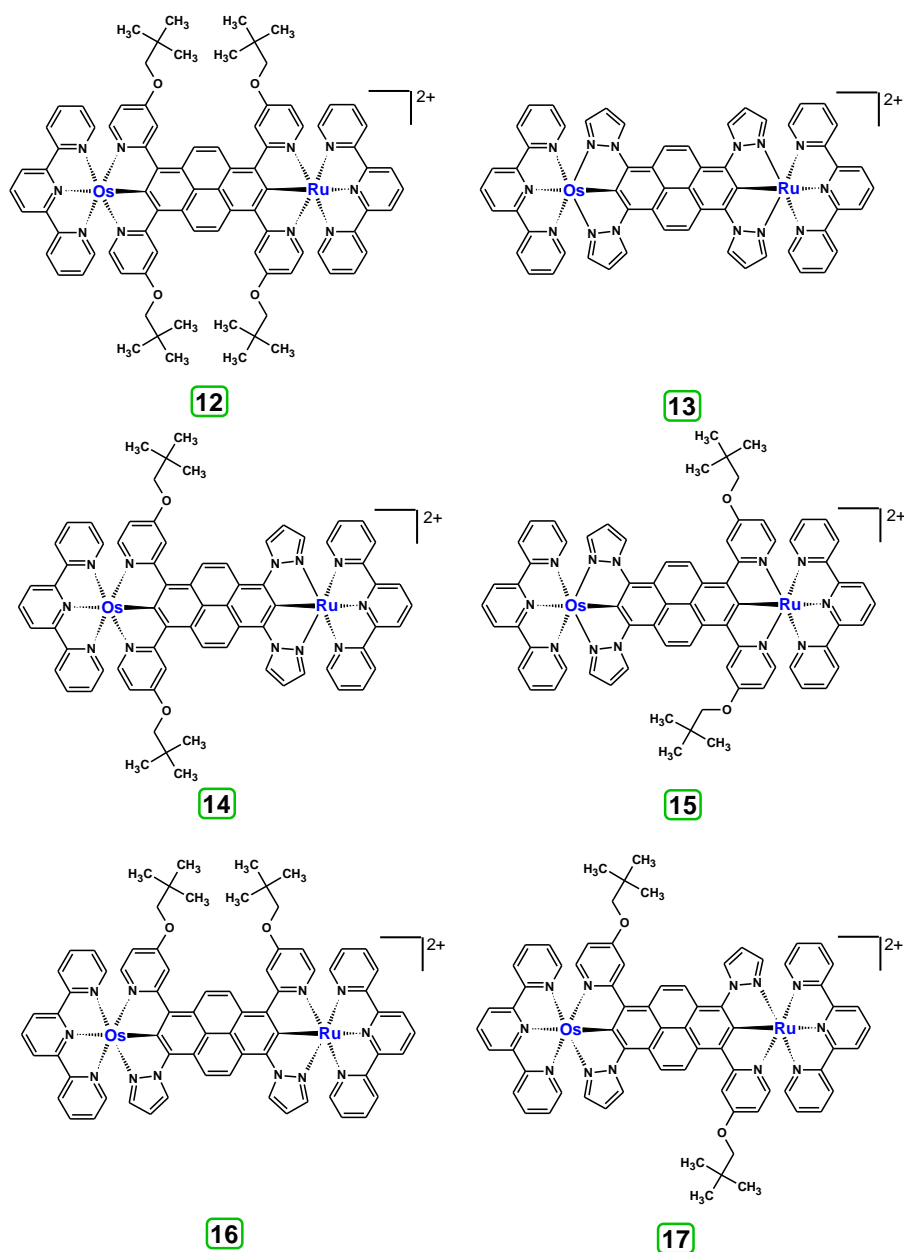
M1 = M2 = Os (a); Ru (b)

Rysunek 25. Dwurdzeniowe homometaliczne związki koordynacyjne osmu **7a–11a** lub rutenu **7b–11b**.

W przypadku dwurdzeniowych homometalicznych związków koordynacyjnych osmu lub rutenu z ligandami zawierającymi dwa rodzaje podstawników, udział poszczególnych metali w tworzeniu orbitali granicznych różni się między sobą, co ma związek z naturą podstawnika, który koordynuje metal. Związki koordynacyjne osmu absorbują światło w szerszym zakresie w porównaniu do analogów rutenu. Pasma o najniższej energii można przypisać głównie jako przejście HOMO → LUMO, a tym samym są to przejścia MLCT (Rysunek 26). Różny sposób podstawienia pirenu dwoma rodzajami grup heteroarylowych ma zdecydowanie mniejszy wpływ na widma nieutlenionych związków koordynacyjnych niż ich form utlenionych, gdzie intensywność pasm niskoenergetycznych znacznie wzrasta, pojawiające się pasma są znacznie przesunięte w stronę dłuższych fal w obszarze NIR.



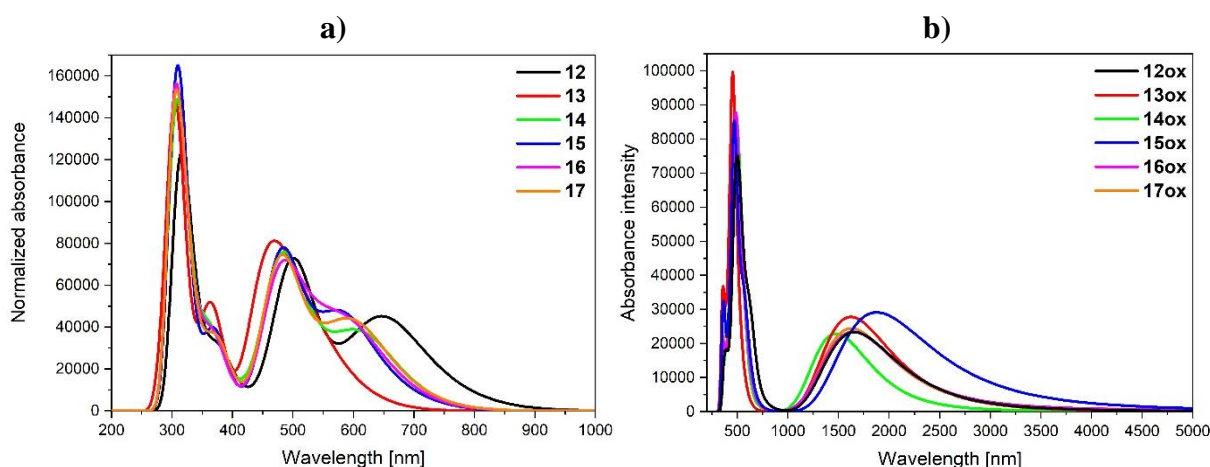
Rysunek 26. (a) Widma teoretyczne dwurdzeniowych związków koordynacyjnych osmu **7a–11a** lub rutenu **7b–11b**, (b) utlenionych form tych związków **7aox–11aox** i **7box–11box**.



Rysunek 27. Dwurdzeniowe heterometaliczne związki koordynacyjne osmu i rutenu 12–17.

W przypadku heterometalicznych dwujądrowych związków koordynacyjnych osmu i rutenu zaobserwowano znaczącą dominację osmu w porównaniu z rutenem w tworzeniu orbitali HOMO. Wartości przerw energetycznych dla heterometalicznych kompleksów dwujądrowych są niższe niż wartości dla odpowiednich cząsteczek rutenu i wyższe niż dla analogów osmu. Kompleksy zawierające NCN-cyklometalujące ligandy pirenowe podstawione z zapewnieniem środka symetrii zmniejszają wartość pasma energetycznego. Obliczone widma absorpcji mają taki sam kształt jak widma obliczone dla dwujądrowych kompleksów homometalicznych i odpowiadają zachowaniu kompleksów osmu, co jest zgodne z większym udziałem osmu w tworzeniu orbitali granicznych w porównaniu z rutenem

(Rysunek 28). Zdecydowanie wyższy (nawet 10-krotny) rozkład gęstości spinu stanu trypletowego o najniższej energii ma miejsce na ośmie. Pasma niskoenergetycznych utlenionych kompleksów są silnie przesunięte ku czerwieni w obszarze NIR z intensywnością wyższą niż w przypadku nieutlenionych, ale niższą niż analogów homometalicznych. Najbardziej intensywne i przesunięte w stronę dłuższych fal pasmo zaobserwowano tam, gdzie koordynacja ma miejsce przez pirazolyl dla Os i pirydyl dla Ru. Jest to obserwacja odwrotna niż w przypadku dwurdzeniowych kompleksów homometalicznych z tym samym ligandem mostkującym, gdzie pasma o niskiej energii były najmniej intensywne i przesunęły się w stronę krótszej długości fali spośród wszystkich utlenionych kompleksów. Przedstawione wyniki wykazały, że właściwości badanych związków zależą od charakteru metali i charakteru ligandów mostkujących. To pokazuje konieczność syntezy i badań eksperymentalnych, zwłaszcza dwurdzeniowych kompleksów heterometalicznych z ligandami NCN-cyklometalującymi, które są podstawione dwoma rodzajami grup heteroarylowych symetrycznie względem środka.



Rysunek 28. (a) Widma teoretyczne dwurdzeniowych heterometalicznych związków koordynacyjnych **12–17**, (b) utlenionych form tych związków **12ox–17ox**.

4.4. Podsumowanie

W wyniku przeprowadzonych badań, stanowiących przedmiot niniejszego osiągnięcia naukowego, wykazano znaczący wpływ podstawienia, liczby podstawników oraz charakteru podstawników na właściwości fotofizyczne docelowych pochodnych pirenu, gdzie podstawienie zachodzi w obszarze non-K oraz pozycjach węzłowych. W ramach przeprowadzonych badań zsyntezowano i scharakteryzowano pod kątem właściwości fotofizycznych (w tym właściwości termiczne, widma absorpcji, emisji, wydajność kwantową fluorescencji, czasy zaniku fluorescencji) mono-, di-, tri- i tetrapodstawione pochodne pirenu.

Dodatkowo, wyniki badań eksperymentalnych oraz modelowanie nowych struktur wsparto wynikami obliczeń kwantowo-chemicznych opartych na metodzie DFT, co przyczyniło się do pełniejszego zrozumienia struktury i zachowania badanych związków. W rezultacie, opisane wyniki, przedstawione w ramach osiągnięcia naukowego, umożliwiły osiągnięcie zaplanowanych celów oraz sformułowanie następujących kluczowych wniosków wynikających z przeprowadzonych badań naukowych:

- Ustalono i usystematyzowano warunki prowadzenia reakcji, oczyszczania i charakterystyki spektroskopowej bromopirenu: 1-bromopirenu, 2-bromopirenu, 2,7-dibromopirenu, 1,6-dibromopirenu, 1,8-dibromopirenu, 1,3-dibromopirenu, 1,7-dibromopirenu, 1,3,6-tribromopirenu i 1,3,6,8-tetrabromopirenu, które stanowią kluczowe substraty do funkcjonalizacji pirenu.
- Wykazano znaczący wpływ liczby i rodzaju podstawników heteroarylowych na właściwości fotofizyczne, zwłaszcza optyczne:
 - ✓ Większa liczba podstawników akceptorowych (triazolu, tetrazolu oraz pirazolu) prowadzi do zwiększenia wydajności kwantowej fluorescencji. Wraz ze wzrostem liczby podstawników, maksima emisji przesuwają się w kierunku fal dłuższych, a efektywny czas zaniku fluorescencji maleje. Obliczenia teoretyczne wykazały, że rosnąca liczba wprowadzonych grup zmniejsza udział pirenu w tworzeniu orbitali granicznych, przy jednoczesnym wzroście udziału podstawników oraz malejącej wartości przerwy energetycznej.
 - ✓ W przypadku wprowadzenia grup donorowych (na przykładzie motywu antracenu), główne maksimum emisji związku tetrapodstawionego jest przesunięte hipsokromowo w porównaniu z analogami mono- i dipodstawionymi. Obserwuje się również spadek wydajności kwantowej fluorescencji wraz ze wzrostem liczby jednostek antracenu oraz zwiększającą się polarnością rozpuszczalnika, przy czym najniższa jest dla tetrapodstawionego pirenu. Analiza orbitali molekularnych wykazała znaczący udział podstawnika w tworzeniu orbitali granicznych (94-99%), z wyjątkiem związku tetrapodstawionego, gdzie udział podstawnika w przypadku orbitalu LUMO spada do 75%. Nie stwierdzono wpływu liczby podstawników na energie orbitali granicznych ani na wartości przerw energetycznych, które przyjmują bardzo zbliżone wartości.

- Zaobserwowano, że pochodne podstawione w pozycjach węzłowych lub w dwóch obszarach: non-K i pozycji węzłowej - charakteryzują się niższą rozpuszczalnością niż pochodne podstawione tylko w obszarze non-K.
- Wykazano, że 1,3,6-tripodstawione i 1,3,6,8-tetrapodstawione pireny wykazują znaczne podobieństwo; na przykładzie układu piren-pirazol, związek zawierający 3 podstawniki wykazuje intensywniejszą emisję, wyższą wydajność kwantową fluorescencji oraz dłuższy efektywny czas życia fluorescencji. Te wyniki sugerują potrzebę i zasadność dalszych badań nad stosunkowo niezbadanymi 1,3,6-tripodstawionymi pochodnymi pirenu.
- Bazując na wynikach obliczeń kwantowo-chemicznych, wykazano, że 1,3-dipodstawione pireny, których synteza nie powiodła się, nie wykazują potencjalnie innych właściwości optycznych w porównaniu do swoich analogów 1,6- i 1,8-, co wskazuje, że wzór podstawienia w dipodstawionych pirenach w obszarze non-K nie wpływa w znaczący sposób na ich właściwości.
- Po raz pierwszy zaprezentowano obliczenia kwantowo-chemiczne dla cząsteczek zawierających od 1 do 4 grup kotwiczących, wraz z produktami chemisorpcji tych molekuł na klastrach (TiO₂)₉. Stosowanie wielu grup kotwiczących może poprawić stabilność i skuteczność transferu ładunku, a modyfikacje te przyczyniły się do zwiększenia wydajności DSSC. Te wyniki sugerują zasadność i potrzebę dalszego badania i optymalizacji barwników opartych na pirenieniu, podstawionym w szczególności w obszarze non-K, w celu uzyskania wydajnych DSSC.
- W przypadku syntezy tetrapodstawionych pirenów zawierających dwa rodzaje podstawników, opracowano sekwencje i warunki reakcji w celu uzyskania oczekiwanych produktów.
- Zbadano i wykazano, że podstawienie pirenu dwoma różnymi grupami heteroaryłowymi w sposób symetryczny względem krótkiej osi symetrii prowadzi do związków o lepszych właściwościach fotofizycznych niż te, w których podstawienie jest asymetryczne lub zawierające tylko jeden rodzaj podstawnika. Wydajność kwantowa luminescencji związków zawierających dwa rodzaje podstawników heteroarylowych jest znacznie wyższa niż dla analogów podstawionych przez jeden rodzaj podstawnika. Otrzymywanie wydajniejszych i efektywniejszych fluoroforów jest możliwe nie tylko poprzez zmianę rodzaju podstawników, ale również poprzez odpowiednie podstawienie już znanych.

- Zauważono, że 1,3,6,8-tetrapodstawione pireny, zawierające dwa rodzaje podstawników, podstawionych symetrycznie względem długiej osi symetrii, mogą wykazywać potencjalnie wyższą wydajność kwantową fluorescencji niż ich analogii, co pozostaje w zgodzie w najnowszym doniesieniu literaturowym (2024) dotyczącym 1,3-dibromopirenu jako prekursora do syntezy tego typu związków.
- Wykazano, że brak jest jednoznacznej tendencji zmian w zakresie stabilności termicznej badanych związków, co wskazuje na indywidualne zachowanie pirenów w zależności od natury podstawnika/podstawników.
- Wykazano potencjalne zastosowania 1,3,6,8-tetrapodstawionych pirenów zawierających dwa rodzaje podstawników jako ligandów NCN-cyklometalujących w jedno- jak i dwurdzeniowych homo- lub heterometalicznych związkach koordynacyjnych na przykładzie rutenu i osmu. Zmiany strukturalne liganda NCN-cyklometalującego wpływają na zachowanie związków koordynacyjnych zarówno pod względem absorpcji przed jak i po utlenieniu, powinowactwa centrum metalicznego do utlenienia, jak również znaczącej zmianie rozmieszczenia orbitali granicznych w zależności od sposobu koordynacji. Wyniki obliczeń wskazują zasadność przeprowadzenia badań eksperymentalnych, zwłaszcza dotyczących dwurdzeniowych kompleksów heterometalicznych z ligandami NCN-cyklometalującymi, które są podstawione dwoma rodzajami grup heteroarylowych symetrycznie względem środka symetrii.

4.5. Literatura

- [1] Figueira-Duarte TM, Müllen K. Pyrene-Based Materials for Organic Electronics. *Chem Rev* 2011;111:7260–314. <https://doi.org/10.1021/cr100428a>.
- [2] Wisniak J. Auguste Laurent: Radical y radicales. *Educación Química* 2009;20:166–75. [https://doi.org/10.1016/S0187-893X\(18\)30023-5](https://doi.org/10.1016/S0187-893X(18)30023-5).
- [3] Vollmann H, Becker H, Corell M, Streeck H. Beiträge zur Kenntnis des Pyrens und seiner Derivate. *Justus Liebigs Annalen Der Chemie* 1937;531:1–159. <https://doi.org/10.1002/jlac.19375310102>.
- [4] Kinik FP, Ortega-Guerrero A, Ongari D, Ireland CP, Smit B. Pyrene-based metal organic frameworks: from synthesis to applications. *Chem Soc Rev* 2021;50:3143–77. <https://doi.org/10.1039/D0CS00424C>.
- [5] Kowser Z, Rayhan U, Akther T, Redshaw C, Yamato T. A brief review on novel pyrene based fluorometric and colorimetric chemosensors for the detection of Cu²⁺. *Materials Chemistry Frontiers* 2021;5:2173–200. <https://doi.org/10.1039/D0QM01008A>.
- [6] Mukherjee A, Akulov AA, Santra S, Varaksin MV, Kim GA, Kopchuk DS, et al. 2,7-Diazapyrenes: a brief review on synthetic strategies and application opportunities. *RSC Advances* 2022;12:9323–41. <https://doi.org/10.1039/D2RA00260D>.

- [7] Jarugu Narasimha Moorthy * †, Palani Natarajan †, Parthasarathy Venkatakrishnan †, Duo-Fong Huang ‡ and, Tahsin J. Chow* ‡. Steric Inhibition of π -Stacking: 1,3,6,8-Tetraarylpyrenes as Efficient Blue Emitters in Organic Light Emitting Diodes (OLEDs) 2007. <https://doi.org/10.1021/OL7023136>.
- [8] Oh H-Y, Lee C, Lee S. Efficient blue organic light-emitting diodes using newly-developed pyrene-based electron transport materials. *Organic Electronics* 2009;10:163–9. <https://doi.org/10.1016/J.ORGEL.2008.10.015>.
- [9] Hu J, Era M, Elsegood MRJ, Yamato T. Synthesis and Photophysical Properties of Pyrene-Based Light-Emitting Monomers: Highly Pure-Blue-Fluorescent, Cruciform-Shaped Architectures. *European Journal of Organic Chemistry* 2010;2010:72–9. <https://doi.org/10.1002/ejoc.200900806>.
- [10] Yu C-C, Jiang K-J, Huang J-H, Zhang F, Bao X, Wang F-W, et al. Novel pyrene-based donor–acceptor organic dyes for solar cell application. *Organic Electronics* 2013;14:445–50. <https://doi.org/10.1016/J.ORGEL.2012.12.013>.
- [11] and ARM, Fréchet* MJM. Organic Semiconducting Oligomers for Use in Thin Film Transistors 2007. <https://doi.org/10.1021/CR0501386>.
- [12] Anthony JE. The Larger Acenes: Versatile Organic Semiconductors. *Angewandte Chemie International Edition* 2008;47:452–83. <https://doi.org/10.1002/anie.200604045>.
- [13] Dewar MJS, Dennington RDI. DEWAR-PI study of electrophilic substitution in selected polycyclic fluoranthene hydrocarbons. *J Am Chem Soc* 1989;111:3804–8. <https://doi.org/10.1021/ja00193a007>.
- [14] Cerfontain H, Laali K, Lambrechts HJA. Aromatic sulfonation 86. Sulfonation of pyrene, 1-methylpyrene and perylene. *Recueil Des Travaux Chimiques Des Pays-Bas* 1983;102:210–4. <https://doi.org/10.1002/recl.19831020404>.
- [15] Zhang Y, Tan L, Shi J, Ji L. Iridium-catalysed borylation of pyrene – a powerful route to novel optoelectronic materials. *New J Chem* 2021;45:14869–78. <https://doi.org/10.1039/D1NJ00538C>.
- [16] Ahn Y, Kim S, Song JH, Yeom W, Lee J, Suh MC. The positional effect of arylamines on pyrene core in a blue fluorescent dopant significantly affecting the performance of organic light emitting diodes. *Dyes and Pigments* 2022;205:110505. <https://doi.org/10.1016/J.DYEPIG.2022.110505>.
- [17] Niko Y, Kawauchi S, Otsu S, Tokumaru K, Konishi G. Fluorescence Enhancement of Pyrene Chromophores Induced by Alkyl Groups through σ – π Conjugation: Systematic Synthesis of Primary, Secondary, and Tertiary Alkylated Pyrenes at the 1, 3, 6, and 8 Positions and Their Photophysical Properties. *J Org Chem* 2013;78:3196–207. <https://doi.org/10.1021/jo400128c>.
- [18] Konidena RK, Justin Thomas KR, Singh M, Jou J-H. Thienylphenothiazine integrated pyrenes: an account on the influence of substitution patterns on their optical and electroluminescence properties. *Journal of Materials Chemistry C* 2016;4:4246–58. <https://doi.org/10.1039/C6TC00354K>.
- [19] Joseph V, Thomas KRJ, Sahoo S, Singh M, Jou J-H. Cyano-functionalized carbazole substituted pyrene derivatives for promising organic light-emitting diodes. *Dyes and Pigments* 2018;158:295–305. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2018.05.038>.
- [20] Lu Q, Kole GK, Friedrich A, Müller-Buschbaum K, Liu Z, Yu X, et al. Comparison Study of the Site-Effect on Regioisomeric Pyridyl–Pyrene Conjugates: Synthesis, Structures, and Photophysical Properties. *J Org Chem* 2020;85:4256–66. <https://doi.org/10.1021/acs.joc.9b03421>.
- [21] Song X, Guo H, Yu S, Huang L, Redshaw C, Zhang Q, et al. Experimental and theoretical studies of the effect of molecular conformation on the photophysical properties in the

- pyrene system. *Dyes and Pigments* 2023;210:111036. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2022.111036>.
- [22] Zhang R, Zhang T, Xu L, Han F, Zhao Y, Ni Z. A new series of short axially symmetrically and asymmetrically 1,3,6,8-tetrasubstituted pyrenes with two types of substituents: Syntheses, structures, photophysical properties and electroluminescence. *Journal of Molecular Structure* 2017;1127:237–46. <https://doi.org/10.1016/J.MOLSTRUC.2016.07.105>.
- [23] Zhang R, Zhao Y, Zhang T, Xu L, Ni Z. A series of short axially symmetrically 1,3,6,8-tetrasubstituted pyrene-based green and blue emitters with 4-tert-butylphenyl and arylamine attachments. *Dyes and Pigments* 2016;130:106–15. <https://doi.org/10.1016/J.DYEPIG.2016.03.020>.
- [24] Zhang R, Sun H, Zhao Y, Tang X, Ni Z. Dipolar 1,3,6,8-tetrasubstituted pyrene-based blue emitters containing electro-transporting benzimidazole moieties: Syntheses, structures, optical properties, electrochemistry and electroluminescence. *Dyes and Pigments* 2018;152:1–13. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2018.01.014>.
- [25] Ganesan P, Rajadurai VS, Sivanadanam J, Ponnambalam V, Rajalingam R. Effect of electron withdrawing anchoring groups on the optoelectronic properties of pyrene sensitizers and their interaction with TiO₂: A combined experimental and theoretical approach. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 2013;271:31–44. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2013.07.010>.
- [26] Kathiravan A, Panneerselvam M, Sundaravel K, Pavithra N, Srinivasan V, Anandan S, et al. Unravelling the effect of anchoring groups on the ground and excited state properties of pyrene using computational and spectroscopic methods. *Phys Chem Chem Phys* 2016;18:13332–45. <https://doi.org/10.1039/C6CP00571C>.
- [27] Zhong YW, Wu SH, Burkhardt SE, Yao CJ, Abruña HD. Mononuclear and dinuclear ruthenium complexes of 2,3-Di-2-pyridyl-5,6-diphenylpyrazine: Synthesis and spectroscopic and electrochemical studies. *Inorganic Chemistry* 2011;50:517–24. <https://doi.org/10.1021/ic101629w>.
- [28] Zhong Y-W, Gong Z-L, Shao J-Y, Yao J. Electronic coupling in cyclometalated ruthenium complexes. *Coordination Chemistry Reviews* 2016;312:22–40. <https://doi.org/10.1016/J.CCR.2016.01.002>.
- [29] Cui B-B, Mao Z, Chen Y, Zhong Y-W, Yu G, Zhan C, et al. Tuning of resistive memory switching in electropolymerized metallopolymeric films. *Chemical Science* 2015;6:1308–15. <https://doi.org/10.1039/C4SC03345K>.
- [30] Zych D, Slodek A, Matuszczyk D, Golba S. Comprehensive Study of Mononuclear Osmium Complexes with Various Pyrene Ligands. *European Journal of Inorganic Chemistry* 2018;2018:5117–28. <https://doi.org/10.1002/ejic.201801199>.
- [31] Crawford AG, Liu Z, Mkhaliid IAI, Thibault M-H, Schwarz N, Alcaraz G, et al. Synthesis of 2- and 2,7-Functionalized Pyrene Derivatives: An Application of Selective C–H Borylation. *Chemistry – A European Journal* 2012;18:5022–35. <https://doi.org/10.1002/chem.201103774>.
- [32] Ruto A, Seki H, Osaki K, Kaneno D, Hadano S, Watanabe S, et al. Synthesis of 1,3-Dibromopyrene as Precursor of 1-, 3-, 6-, and 8-Substituted Long-Axially Symmetric Pyrene Derivatives. *Chemistry – A European Journal* n.d.;n/a:e202401152. <https://doi.org/10.1002/chem.202401152>.

5. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

- **01.06.2019 - 30.11.2019** staż podoktorski w Institute Silicon Photovoltaics, Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie GmbH, Berlin, Niemcy

W trakcie realizacji stażu podoktorskiego miałem możliwość pracować w Instytucie Ogniw Fotowoltaicznych, będącym częścią Instytutu Helmholtza w Berlinie we współpracy z dr. Jörgiem Rappichem i innymi naukowcami. Głównym celem moich badań było rozwijanie warstw aktywnych dedykowanych wysokowydajnym ogniwom słonecznym poprzez metodę elektrografting, czyli elektrochemiczną funkcjonalizację warstw złota oraz krzemu odpowiednio zaprojektowanymi związkami organicznymi. Staż ten umożliwił mi gruntowne poznanie metod elektrochemicznych, które dotychczas nie były przedmiotem moich badań. W realizowanych badaniach koncentrowałem się na pochodnych antracenu, podstawianych poprzez halogeny, grupę aminową, ugrupowania aryłowe i inne. Wybór ten był podyktowany interesującymi właściwościami antracenu w technologiach fotowoltaicznych. W przypadku związków zawierających grupy aminowe, konieczne było otrzymanie soli diazoniowych, które były odpowiednie do procesu elektrograftingu. Kolejnym istotnym rezultatem było określenie wpływu podstawnika w przypadku dipodstawionych antracenów podczas przyłączania molekuł do warstw złota. Oprócz opracowania warunków eksperymentalnych i otrzymania warstw pochodnych antracenu, kluczowym elementem pracy była ich charakterystyka. Podstawową metodą była elipsometryczna spektroskopia IR, badania te były realizowane we współpracy z PD Dr. Karsten Hinrichs z Leibniz-Institut für Analytische Wissenschaften - ISAS Berlin. Dodatkowo otrzymane warstwy analizowano za pomocą rentgenowskiej spektrometrii fotoelektronów (XPS) oraz oznaczano ilościowo powstałe warstwy za pomocą Quartz Crystal Microbalance (QCM). Potwierdzenie otrzymania oczekiwanej warstwy pozwoliło na przeprowadzenie kolejnych niezbędnych badań, takich jak spektroskopia fotoluminescencyjna. W trakcie stażu sprawowałem również opiekę nad studentem studiów drugiego stopnia na kierunku chemia - Minh Hai Nguyen z Humboldt-Universität zu Berlin. Realizacja stażu w Instytucie Ogniw Fotowoltaicznych w Berlinie pozwoliła mi na poznanie i uczestnictwo w badaniach bezpośrednio związanych z aplikacjami. Odbycie stażu w tak prestiżowym ośrodku badawczym istotnie przyczyniło się do mojego osobistego rozwoju naukowego. Warto również dodać, że opublikowane prace: [H5], [H8], [H9], [P19], [P20],

[P22] są afiliowane również przez Institute Silicon Photovoltaics, Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie GmbH, Berlin.

- **Współpraca z Dr. Sambathkumar Subramaniyan Vivekanandha College of Arts and Sciences for Women (A)**

Od 2019 roku współpracuję z Dr. Sambathkumar Subramaniyan z Vivekanandha College of Arts and Sciences for Women (A), Indie. Nasze wspólne działania skutkowały opublikowaniem pracy [P24]. W ramach współpracy, zostałem zaproszony przez komitet organizacyjny International Virtual Conference on “Recent Advances in Chemical Sciences” (iCRACS 2020 (virtual)) z PG and Research Department of Chemistry, Vivekanandha College of Arts and Sciences for Women (Autonomous) Indie, Tamil Nadu 12.12.2020, na konferencje gdzie miałem zaszczyt wygłosić wykład inauguracyjny pt. *"Chemistry of Pyrene Derivatives: Never-ending Story in Obtaining of Promising Materials to Various Applications"*.

- **Zagraniczna aktywność naukowa w okresie przed uzyskaniem stopnia doktora**

Ponadto, moje doświadczenie obejmuje prace badawcze i staże w renomowanych instytucjach naukowych, w tym Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie GmbH w Berlinie oraz UBICHEM Research Ltd. w Budapeszcie, co poszerzyło moje horyzonty naukowe i umożliwiło mi zdobycie cennego doświadczenia w pracy z różnymi metodami syntezy i charakterystyki materiałów funkcjonalnych.

03.08.2015 - 25.09.2015 Staż zagraniczny w ramach letniego programu studenckiego w Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie GmbH, Berlin, Niemcy

- ✓ Synteza potencjalnych materiałów termoelektrycznych (chemia ciała stałego)
- ✓ Otrzymywanie monokryształów spineli z wykorzystaniem metody topnienia z wędrującą strefą
- ✓ Charakterystyka związków pośrednich oraz produktów docelowych za pomocą rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej oraz obrazów Lauego

Opieka naukowa: dr Katharina Fritsch oraz dr Katrin Meier-Kirchner

28.01.2015 - 27.02.2015 Staż zagraniczny w ramach programu Partnerstwo-Aktywizacja-Staże (PAS) w UBICHEM Research Ltd., Budapeszt, Węgry

✓ Opracowywanie warunków reakcji metatezy wraz z odpowiednim doborem katalizatora [Mo], [Ru] w celu otrzymania produktów z największą wydajnością, praca w warunkach ściśle beztlenowych (glovebox)

✓ Analiza otrzymanych produktów metodami: LC-MS, IR, NIR, NMR

Opieka naukowa: dr István Csonka

- **Krajowa aktywność naukowa w okresie przed uzyskaniem stopnia doktora**

01.10.2015 - 31.12.2015 Staż w ramach programu "*Budujemy wartość polskiej gospodarki. Pracuj dla nas!*" w Grupa Azoty Zakłady Azotowe Kędzierzyn-Koźle S.A.

✓ Opracowywanie i wdrożenie metod analitycznych do oznaczania różnych form azotu w nawozach RSM (roztwory saletrzano-mocznikowe)

✓ Wdrażanie aparatury badawczo-pomiarowej

✓ Walidacja metod analitycznych

✓ Opracowywanie dokumentacji badawczej

Opieka naukowa: dr Ewa Pankalla

- **Krajowa współpraca naukowa**

✓ **dr hab. Aneta Słodek, Prof. UŚ** Uniwersytet Śląski w Katowicach

✓ **Prof. dr hab. Robert Musioł** Uniwersytet Śląski w Katowicach

✓ **dr Sylwia Zimosz** Uniwersytet Śląski w Katowicach

✓ **dr hab. Anna Mrozek-Wilczkiewicz** Politechnika Śląska

✓ **dr Katarzyna Malarz** Politechnika Śląska

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

6.1. Prowadzenie zajęć dydaktycznych

2015/2016 • Chemia (lic.), UŚ, **Kataliza**, laboratorium, 5h

• Technologia Chemiczna (inż.), UŚ, **Kataliza i procesy katalityczne**, laboratorium, 60h

• Chemia (mgr), UŚ, **Laboratorium specjalizacyjne A**, laboratorium, 25h

2016/2017 • Chemia (lic.), UŚ, **Chemia nieorganiczna A**, laboratorium, 45h

• Technologia Chemiczna (inż.), UŚ, **Podstawy chemii**, laboratorium, 45h

- 2017/2018**
- Chemia (lic.), UŚ, **Chemia nieorganiczna A**, laboratorium, 45h
 - Technologia Chemiczna (inż.), UŚ, **Podstawy chemii**, laboratorium, 45h
- 2018/2019**
- Chemia (lic.), UŚ, **Chemia nieorganiczna A**, laboratorium, 50h
- 2020/2021**
- Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Pracownia dyplomowa**, seminarium, 15h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Chemia nieorganiczna**, wykład, 27h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Biochemia**, wykład, 18h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Biochemia**, ćwiczenia, 18h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Chemia organiczna**, wykład, 54h (2x27h)
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Metody obliczeniowe chemii kwantowej**, wykład, 18h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Modelowanie molekularne**, laboratorium, 72h (2x36h)
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Projekt**, laboratorium, 18h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Projekt zespołowy**, laboratorium, 36h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Chemia kwantowa**, wykład, 27h
 - Informatyka w języku angielskim (inż.), WWSIS, **OSH and Ergonomics**, wykład, 9h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Trendy w Bioinformatyce**, seminarium, 9h
 - Informatyka w języku angielskim (inż.), WWSIS, **Business Plan**, wykład, 18h
 - Informatyka w języku angielskim (inż.), WWSIS, **Business Plan**, ćwiczenia, 9h
- 2021/2022**
- Chemia (lic.), UO, **Chemia nieorganiczna**, laboratorium, 60h
 - Chemia (lic.), UO, **Chemia ogólna**, laboratorium, 60h
 - Farmacja (mgr), UO, **Chemia ogólna i nieorganiczna**, laboratorium, 90h
 - Biotechnologia (lic.), UO, **Biochemia**, laboratorium, 45h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Chemia organiczna**, wykład, 27h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Modelowanie molekularne białek**, wykład, 6h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Modelowanie molekularne białek**, laboratorium, 12h
- 2022/2023**
- Chemia (lic.), UO, **Chemia nieorganiczna**, laboratorium, 60h
 - Chemia (lic.), UO, **Chemia ogólna**, laboratorium, 60h
 - Chemia (lic.), UO, **Przygotowanie pracy i egzaminu dyplomowego**

- Farmacja (mgr), UO, **Chemia ogólna i nieorganiczna**, laboratorium, 90h
- Ochrona Środowiska (lic.), UO, **Chemia nieorganiczna**, laboratorium, 30h
- Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Metody obliczeniowe chemii kwantowej**, wykład, 18h
- Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Modelowanie molekularne**, laboratorium, 36h
- Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Chemia kwantowa**, wykład, 27h

- 2023/2024**
- Chemia (lic.), UO, **Chemia nieorganiczna**, laboratorium, 60h
 - Chemia (lic.), UO, **Chemia ogólna**, laboratorium, 45h
 - Chemia (mgr), UO, **Przygotowanie pracy i egzaminu dyplomowego**
 - Chemia (mgr), UO, **Pracownia magisterska I**, laboratorium, 20h
 - Chemia (mgr), UO, **Pracownia magisterska II**, laboratorium, 15h
 - Farmacja (mgr), UO, **Chemia ogólna i nieorganiczna**, laboratorium, 90h
 - Biotechnologia (lic.), UO, **Biochemia**, laboratorium, 30h
 - Bioinformatyka (inż.), WWSIS, **Metody obliczeniowe chemii kwantowej**, wykład, 18h

WWSIS - Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej; UŚ - Uniwersytet Śląski;
 UO - Uniwersytet Opolski

6.2. Opieka naukowa nad studentami

- **od 2022 - nadal** Opiekun Naukowy Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN
- **2023** Wyróżnienie w kategorii Opiekun Naukowy roku 2023 za wspierania Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN w konkursie StRuNa 2023 organizowanym przez Fundusz Pomocy Studentom
- **2023** Wyróżnienie w kategorii Debiut Roku 2023 dla Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN w konkursie StRuNa 2023 organizowanym przez Fundusz Pomocy Studentom

Promotor prac dyplomowych

1. *Drug design - from the structure of a molecule to theoretical considerations of its biological activity*, Angelika Mazur, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej, data obrony: 04.12.2021
2. *Nowe fluorofory oparte na strukturze symetrycznie podstawionych pirenów w pozycjach węzłowych*, Błażej Babiuch, praca licencjacka, Uniwersytet Opolski, data obrony: 13.07.2023

3. *Projekt strony internetowej wspomagającej kontrolę diety niskowęglowodanowej w walce z chorobami związanymi z insuliną*, Aleksandra Krzywdzińska, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej, data obrony: 15.07.2023
4. *Terpyridines and their complexes with transition metals as well known antitumor agents – new directions based on in silico studies*, Patrycja Sobkowiak, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej, data obrony: 30.09.2023
5. *Proces poboru pierwiastków śladowych w mchu Pleurozium schreberi transplantowanego na obszary zurbanizowane - badanie chemizmu wspomaganego narzędziami bioinformatycznymi*, Grzegorz Kosior, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej
6. *Wpływ sposobu podstawienia pirenu na właściwości fotofizyczne - strategie syntezy i charakterystyka w kierunku wydajnych fluoroforów*, Martyna Kubis, praca magisterska, Uniwersytet Opolski, data obrony: 25.06.2024
7. *1,3,6-Tripodstawione i 1,3,6,8-tetrapodstawione pireny - badanie wpływu liczby podstawników na właściwości fotofizyczne nowych układów do zastosowań w organicznej elektronice*, Joanna Nowak, praca magisterska, Uniwersytet Opolski

Recenzent prac dyplomowych

1. *Projekt aplikacji edukacyjnej o białkach dla uczniów liceum*, Paweł Wójcik, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej
2. *Projekt symulatora krzyżówek genetycznych*, Karolina Kępa, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej
3. *Ziołolecznictwo w wybranych chorobach pasożytniczych – projekt strony internetowej*, Hanna Mrówczyńska, praca inżynierska, Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej

Opiekun prac dyplomowych

1. *Synteza ligandów N-donorowych, tri- i polidentnych oraz kompleksów rutenu z tymi ligandami*, Monika Dyja, praca magisterska, Uniwersytet Śląski, 2016
2. *New NCN-coordinating ligands based on pyrene structure with potential application in organic electronics*, Aneta Kurpanik, praca magisterska, Uniwersytet Śląski, 2017

3. *Cyclometalated osmium complexes as potential materials dedicated to modern technologies - synthesis and characterization*, Daniel Matuszczyk, Uniwersytet Śląski, praca magisterska, 2018
4. *Monometaliczne binuklearne związki kompleksowe mostkowane pochodnymi pirenu*, Krystian Pożoga, praca magisterska, Uniwersytet Śląski, 2018
5. *Pochodne 4'-fenylo-2,2':6',2''-terpirydyny zawierające motyw 4-arylo-1,2,3-triazolowy - synteza i właściwości*, Dżastin Zimny, praca licencjacka, Uniwersytet Śląski, 2018
6. *Badania nad powiększaniem skali wytwarzania 4-(p-bromofenylo)-2,2';6',2''terpirydyny*, Krystian Pożoga, praca inżynierska, Uniwersytet Śląski, 2019

Opiekun naukowy studentów – projekty

1. *"Od sadzy do materiałów do zastosowań w fotoelektronice - strategię syntezy i charakterystyki na przykładzie pochodnych pirenu w myśl chemii zrównoważonego rozwoju"*, Talenty Jutra II, Fundacja empiria i wiedza, 37/TJ_2/2023, Martyna Kubis, finalistka, kwota: 25 000 PLN

Opiekun naukowy studentów – nagrodzone wystąpienia

1. Martyna Kubis, *"Jak świadomie wpływać na właściwości optyczne pochodnych pirenu - czyli w poszukiwaniu sposobu podstawienia (obszar non-K i pozycje węzłowe) w celu otrzymania wydajnych fluoroformów"*, VI Ogólnopolska Konferencja Studenckich Kół Naukowych „Badania, innowacje i pasje z perspektywy młodego naukowca”, 18.05.2023, komunikat ustny (**wyróżnienie**)
2. Martyna Kubis, *"1,3,6-Tripodstawione vs. 1,3,6,8-tetrapodstawione pireny - czy jeden podstawnik więcej znacznie wpływa na właściwości fotofizyczne tych układów?!"*, Wkraczając w świat nauki 2023, VII Ogólnopolska Konferencja Młodych Naukowców, Wrocław, 15.09.2023, komunikat ustny (**wyróżnienie**)
3. Łukasz Rybski, *"Układy typu A- π -A-A/D zawierające funkcjonalizowany motyw 1,2,3-triazolowy lub 1,2,3,4-tetrazolowy jako nowe środki przeciwnowotworowe"*, VI Ogólnopolska Konferencja Studenckich Kół Naukowych „Badania, innowacje i pasje z perspektywy młodego naukowca”, 18.05.2023, komunikat ustny (**wyróżnienie**)
4. Łukasz Rybski, Martyna Kubis, Julia Murza, Dawid Zych, *"Nie tylko Śniadecki – o Filipie Neriuszu Walterze słów kilka"*, XIV Międzynarodowa Konferencja

Naukowa „Horyzonty Nauki”, 12-13.06.2023, wystąpienie posterowe (**wyróżnienie publiczności**)

5. Łukasz Rybski, Martyna Kubis, Dawid Zych, *"Funkcjonalizowane pireny w płaszczyźnie węzłowej – oczekiwany kierunek czy ślepa uliczka w drodze do wydajnych fluoroforów"*, Wkraczając w świat nauki 2023, VII Ogólnopolska Konferencja Młodych Naukowców, 14-15.09.2023, komunikat ustny (**II miejsce**)
6. Łukasz Rybski, Dawid Zych, *"Kolekcja szkła, sprzętu oraz narzędzi w laboratorium chemicznym, czyli przegląd „skarbów” z mijającej epoki w chemii"*, 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 18-22.09.2023, wystąpienie posterowe (**wyróżnienie**)
7. Julia Murza, Dawid Zych, *"Kuloodporni, czyli Stephanie Kwolek i jej Kevlar®"*, Zjazd Zimowy SMPTChem, 9.12.2022, wystąpienie posterowe (**nagroda komitetu naukowego**)

6.3. Projekty dydaktyczne

2022-2023 Inclusion and Diversity Fund, Royal Society of Chemistry, *"Exploring chemistry from a historical perspective as a method that breaks the stereotype of inaccessible science and enriches the presentation of scientific knowledge"*, 5000 GBP, kierownik projektu

2023 „Uczelnie Przyszłości” Narodowe Centrum Badań i Rozwoju

Mentor wiodący w projekcie: *"Właściwości absorpcyjno-emisyjne pochodnej fenotiazyny o potencjalnym zastosowaniu w produkcji ogniw słonecznych"*, Igor Grabowski

Mentor wspierający w projekcie: *"Funkcjonalne materiały stosowane w zielonych technologiach – układy donor-akceptor (D-A) oparte na motywie fenotiazyny"*, Mateusz Pączek

2022-2023 Zwiększanie dostępności do kształcenia w WWSIS (Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej) – nagrania audio-video dla kierunku Bioinformatyka:

- Biochemia, wykład, 15h
- Metody obliczeniowe chemii kwantowej, wykład, 15h
- Chemia kwantowa, wykład, 30h
- Modelowanie molekularne białek, wykład, 15h
- Projektowanie leków, wykład, 15h

6.4. Działalność popularyzatorska i organizacyjna

Wykłady i spotkania dla uczniów i studentów:

1. *"Ocalić od zapomnienia, czyli Jan Czochralski – wielki nieznany Polak"* – Szkoła Podstawowa i Liceum Ogólnokształcące Filomata w Gliwicach, 02.06.2023
2. *"Jan Czochralski – a kto to taki?!"*, Noc Nauki - Opolski Festiwal Nauki, 19.05.2023
3. *"Ocalić od zapomnienia, czyli Jan Czochralski – wielki nieznany Polak"* – Spotkanie Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN, 17.05.2023
4. *"Wieczór z Marią Skłodowską-Curie"*, Spotkanie Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN, 31.03.2023
5. *"Rozwój systematyki pierwiastków chemicznych - czyli długa droga do układu okresowego pierwiastków"* – Spotkanie Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN, 25.01.2023

Konkursy:

- **2024** Członek Komisji Turniejowej XXVII Opolskiego Turnieju Chemicznego organizowanego przez Wydział Chemii i Farmacji Uniwersytetu Opolskiego
- **2024** Członek Komitetu Organizacyjnego II. Ogólnopolskiego konkursu „Kartka dla Chemika” organizowanego przez Koło Naukowe Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN
- **2023** Członek Komisji Turniejowej XXVI Opolskiego Turnieju Chemicznego organizowanego przez Wydział Chemii Uniwersytetu Opolskiego
- **2023** Członek Komitetu Organizacyjnego I. Ogólnopolskiego konkursu „Kartka dla Chemika” organizowanego przez Koło Naukowe Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN
- **2015, 2016, 2017** Członek Komitetu Organizacyjnego Ogólnopolskiego Konkursu Chemicznego organizowanego przez Uniwersytet Śląski w Katowicach

Konferencje:

- **20-21.04.2024** Baltic Natural Sciences Conference (NSBC), członek Komitetu Naukowego

- **29-31.05.2024** The 3rd International Electronic Conference on Processes, recenzent zgłoszeń konferencyjnych
- **10.12.2022** Pomoc w organizacji Zjazdu Zimowego Sekcji Młodych Polskiego Towarzystwa Chemicznego (SMPTChem) 2022

7. Oprócz kwestii wymienionych w pkt. 1-6, wnioskodawca może podać inne informacje, ważne z jego punktu widzenia, dotyczące jego kariery zawodowej.

Współpraca ekspercka:

- **21.03.2024** Podjęcie współpracy eksperckiej w ramach programu FENG (Fundusze Europejskie dla Nowoczesnej Gospodarki) z Narodowym Centrum Badań i Rozwoju nr umowy: F24/2024
- **26.09.2023** Podjęcie współpracy eksperckiej z Narodowym Centrum Badań i Rozwoju nr umowy: 132/2023
- **od 2023 - nadal** Egzaminator maturalny z chemii, OKE Jaworzno, nr egzaminatora: 236201490
- **02.12.2022** Laureat konkurs na kandydata spełniającego wymagania określone dla autora/recenzenta materiałów egzaminacyjnych z przedmiotów ogólnokształcących
- **10.03.2020** Podjęcie współpracy eksperckiej z Fundacją na rzecz Nauki Polskiej nr umowy: 694/2020/LKE

Szkolenia i kursy:

- **2024** AgilePM® Foundation (akredytowane szkolenie z międzynarodowym egzaminem, Doskam Sp. z o.o)
- **2024** Rola i zadania eksperta w wyborze projektów w programie FENG (Narodowe Centrum Badań i Rozwoju)
- **2024** Ścieżka smart FENG – model oceny projektów (Narodowe Centrum Badań i Rozwoju)
- **2024** Jak przygotować recenzję wniosku o zmianę lub recenzję raportu? (Narodowe Centrum Badań i Rozwoju)
- **2024** Rola eksperta w kontroli projektów (Narodowe Centrum Badań i Rozwoju)
- **2024** Ocena wniosków o dofinansowanie w konkursach krajowych, strategicznych i międzynarodowych (Narodowe Centrum Badań i Rozwoju)
- **2023** TGLS DIRECT (The Global Language System) Deuschtest Zertifikat, poziom B2.

- **2023** Warsztaty wprowadzające do tematyki niepełnosprawności (Projekt *"Uniwersytet Opolski uczelnia (bardzo!) dostępna"*)
- **2023** Warsztat specjalistyczny z zakresu wiedzy o niepełnosprawności (Projekt *"Uniwersytet Opolski uczelnia (bardzo!) dostępna"*)
- **2023** Warsztat specjalistyczny doskonalący z zakresu wiedzy o niepełnosprawności (Projekt *"Uniwersytet Opolski uczelnia (bardzo!) dostępna"*)
- **2023** Rozpowszechnianie informacji naukowych we współczesnych mediach (7. Ogólnopolski Kongres Kół Naukowych IKONA 2023)
- **2023** Innovating for the future of sustainable labs (Chemistry World, RSC)
- **2023** Laboratorium Design Thinking – Jak Edukować z Pasją (POPOJUTRZE 2.0)
- **2023** Unconscious Bias Training (iHasco - a citation company)
- **2023** Kim jest ekspert NCBR? (Narodowe Centrum Badań i Rozwoju)
- **2022** Przeciwdziałanie korupcji (Centralne Biuro Korupcyjne)
- **2022** Korupcja w biznesie (Centralne Biuro Korupcyjne)
- **2022** Korupcja w administracji publicznej (Centralne Biuro Korupcyjne)
- **2022** Projektanci Design Thinking (Polski Fundusz Rozwoju)
- **2021** Druk 3D (Park Naukowo-Technologiczny "Technopark Gliwice")
- **2021** Komunikacja w zespole, umiejętności przywódcze i zarządzani projektami (Akademia Liderów Rzeczypospolitej)
- **2021** Zarządzanie projektami dla początkujących (Polska Agencja Rozwoju Przedsiębiorczości)
- **2021** Creative Skills for Innovation (PFR Projektanci Innowacji)
- **2021** Auditor wewnętrzny systemu zarządzania w laboratoriach badawczych i wzorcujących wg PN-EN ISO/IEC 17025:2018-02
- **2020** Auditor wewnętrzny systemu zarządzania jakością wg PN-EN ISO 9001:2015
- **2020** Lean Canvas (Polski Fundusz Rozwoju)
- **2013** Auditor wewnętrzny systemu zarządzania BHP wg PN-N 18001
- **2013** Solar Energy (Delft University of Technology)

Nagrody:

- **2023** Laureat III miejsca w Plebiscybie Edukacyjnym 2023 w kategorii Nauczyciel Akademicki Roku organizowanym przez Polska Press sp. z o.o., lokalnie w województwie opolskim prowadzonym na łamach „Nowej Trybuny Opolskiej”
- **2023** Wyróżnienie w kategorii Opiekun Naukowy roku 2023 za wspierania Koła Naukowego Chemików Uniwersytetu Opolskiego KORONAN w konkursie StRuNa 2023 organizowanym Fundusz Pomocy Studentom
- **2023** Nagroda Rektora Uniwersytetu Opolskiego za osiągnięcia w roku akademickim 2022/2023

- **2018** Wyróżnienie JM Rektora Uniwersytetu Śląskiego za działalność naukową w X edycji Konkursu Wyróżnień JM Rektora UŚ
- **2015** Wyróżnienie w konkursie "Studencki Nobel 2015" organizowanym przez Niezależne Zrzeszenie Studentów Politechniki Warszawskiej
- **2015** Laureat I edycji konkursu o staż "Budujemy wartość polskiej gospodarki. Pracuj dla nas!" organizowanego przez Ministerstwo Skarbu Państwa
- **2014** Laureat konkursu Złoty Medal Chemii 2014 organizowanego przez Polską Akademię Nauk Instytut Chemii Fizycznej w Warszawie oraz firmę DuPont (wyróżnienie oraz nagroda finalistów)

Stypendia:

- **2024 - 2027** Stypendium Ministra Nauki dla wybitnych młodych naukowców (edycja 19)
- **2022** Stypendium Rozwojowe Santander, Akademicki Pakiet Wiedzy
- **2018/2019** Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia dla doktorantów
- **2015/2016; 2014/2015; 2012/2013** Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia dla studentów
- **2017/2018; 2015/2016** Stypendium Rektora Uniwersytetu Śląskiego dla najlepszego doktoranta
- **2018/2019; 2017/2018; 2016/2017; 2015/2016** Stypendium doktoranckie wraz z dotacją projakościową
- **2015/2016; 2014/2015; 2013/2014; 2012/2013** Stypendium Rektora Uniwersytetu Śląskiego dla najlepszych studentów
- **2018/2019; 2017/2018; 2015/2016** Stypendium Starosty Powiatu Tarnogórskiego dla najlepszych studentów

Podpisane elektronicznie przez Dawid Mariusz
Zych (Certyfikat kwalifikowany) w dniu 2024-06-28.

.....
(podpis wnioskodawcy)



**WYDZIAŁ
CHEMII I FARMACJI
UNIWERSYTET OPOLSKI**

dr inż. Dawid Zych

Katedra Chemii Nieorganicznej i Strukturalnej

Instytut Chemii

Wydział Chemii i Farmacji

Uniwersytet Opolski

ul. Oleska 48

45-052 Opole

tel. (77) 452-71-17

email: dawid.zych@uni.opole.pl; dawidzych92@gmail.com

**WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH STANOWIĄCYCH ZNACZNY
WKŁAD W ROZWÓJ NAUK CHEMICZNYCH**

***Wpływ podstawienia mono-, di-, tri- i tetra- podstawionych pirenów
w obszarze węzłowym oraz non-K na ich właściwości fotofizyczne***

Opole 2024

**I. WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219
UST. 1. PKT 2 USTAWY**

**1. Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1.
pkt 2b ustawy**

- [H1]** D. Zych*, M. Kubis, "Bromopyrene Symphony: Synthesis and Characterisation of Isomeric Derivatives at Non-K Region and Nodal Positions for Diverse Functionalisation Strategies", *Molecules*, 29, 1131, **2024**, doi.org/10.3390/molecules29051131
IF = 4.2, IF₅ = 4.6, MNISW = 140 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, częściowym przeprowadzeniu badań eksperymentalnych - synteza i badania spektroskopowe, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

- [H2]** D. Zych*, A. Słoddek, N. Krzyżanowski, "The influence study of the number of substituted heteroaryls at the non-K region of pyrene structure on the photophysical properties based on the example of pyrene with 1-decyl-1H-1,2,3-triazole motif", *Journal of Molecular Structure*, 1269C, 133797, **2022**, doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133797
IF = 3.841, IF₅ = 3.138, MNISW = 70 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT, przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych - widma absorpcji i stabilności termicznej, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

- [H3]** D. Zych*, S. Zimosz, M. Kubis, K. Ejsmont, A. Słoddek, "Fine-tuning photophysical properties in pyrene derivatives: Unravelling the impact of substitution patterns with incorporation of a strong electron-donating group", *Dyes and Pigments*, 229, 112285, **2024**, doi.org/10.1016/j.dyepig.2024.112285
IF = 4.1, IF₅ = 3.7, MNISW = 100 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT z wyjątkiem indeksów HOMA i PDI,

przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez i oczyszczania produktów docelowych, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych - widma absorpcji, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

- [H4] **D. Zych***, S. Zimosz, M. Kubis, A. Słodek "Pyrene-pyrazole systems – Elucidating the impact of substitution patterns in the group of Mono-, Di-, Tri- and tetrasubstituted derivatives on emission behaviour through experimental and theoretical approaches", *Journal of Molecular Liquids*, 407C, 125250, **2024**, doi.org/10.1016/j.molliq.2024.125250
IF = 5.3, IF₅ = 5.1, MNISW = 100 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT, przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez i oczyszczania produktów docelowych, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych - widma absorpcji, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

- [H5] **D. Zych***, "Non-K region disubstituted pyrenes (1,3-, 1,6- and 1,8-) by (hetero)aryl groups - review", *Molecules*, 24(14), 2551, **2019**, doi.org/10.3390/molecules24142551
IF = 3.267, IF₅ = 3.589, MNISW = 100 pkt

- [H6] **D. Zych***, A. Słodek, A. Frankowska, "Is it worthwhile to deal with 1,3-disubstituted pyrene derivatives? - photophysical, optical and theoretical study of substitution position effect of pyrenes containing tetrazole groups", *Computational Materials Science*, 165C, 101-113, **2019**, doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.04.041
IF = 2.863, IF₅ = 2.801, MNISW = 100 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT, przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez i oczyszczania produktów docelowych, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

[H7] **D. Zych***, "The impact of the number of anchoring groups and the pattern of substitution on the efficacy of pyrene dyes in dye-sensitised solar cells – a theoretical investigation of multiple chemisorptions on TiO₂ clusters", Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry, 445, 115029, **2023**, doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.115029
IF = 4.1, IF₅ = 3.7, MNISW = 70 pkt

[H8] **D. Zych***, A. Slodek, "Pyrene derivatives with two types of substituents at positions 1-, 3-, 6-, and 8- – fad or necessity?", RSC Advances, 9, 24015-24024, **2019**, doi.org/10.1039/c9ra04503a
IF = 3.119, IF₅ = 3.098, MNISW = 100 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT, przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez i oczyszczania, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych - widma absorpcji, stabilność termiczna, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

[H9] **D. Zych***, A. Slodek, "Double NCN-cyclometalating pyrene derivatives with two kinds of substituents – experimental and theoretical investigations", Journal of Molecular Structure, 1202, 127282, **2020**, doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127282
IF = 3.196, IF₅ = 2.618, MNISW = 70 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT, przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez i oczyszczania, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych - widma absorpcji, stabilność termiczna, przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

[H10] **D. Zych***, A. Slodek, "The Impact of a 1,2,3-Triazole Motif on the Photophysical Behavior of Non-K Tetrasubstituted Pyrene with a Substitution Pattern Providing the Long Axial Symmetry", Molecules, 27(13), 4314, **2022**, doi.org/10.3390/molecules27134314
IF = 4.927, IF₅ = 5.110, MNISW = 140 pkt

Mój udział polegał na stworzeniu koncepcji pracy, opracowaniu planu badawczego i ustaleniu metodyki badawczej, wykonaniu i analizie wyników

obliczeń teoretycznych DFT/TD-DFT, przeprowadzeniu badań eksperymentalnych: syntez i oczyszczania, badania spektroskopowe oraz częściowo pomiarów właściwości fotofizycznych - widma absorpcji, stabilność termiczna, zbieraniu, organizowaniu i przygotowaniu wszystkich danych do analizy, przygotowaniu oryginalnej wersji manuskryptu oraz przeglądzie i redakcji tekstu uwzględniającej sugestie recenzentów.

- [H11] **D. Zych***, "DFT/TD-DFT Framework of Mixed-Metal Complexes with Symmetrical and Unsymmetrical Bridging Ligands—Step-By-Step Investigations: Mononuclear, Dinuclear Homometallic, and Heterometallic for Optoelectronic Applications", *Materials*, 14, 7783, **2021**, doi.org/10.3390/ma14247783
IF = 3.623, IF₅ = 3.920, MNISW = 140 pkt

II. WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ

1. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych

Przed uzyskaniem stopnia doktora:

- [P1] G. Szafraniec-Gorol*, A. Slodek, E. Schab-Balcerzak, M. Grucela, M. Siwy, M. Filapek, M. Matussek, **D. Zych**, S. Maćkowski, D. Buczyńska, J. Grzelak, K. Erfurt, A. Chrobok, S. Krompiec, "Cyclometalated NCN platinum(II) acetylide complexes - Synthesis, photophysics and OLEDs fabrication", *Optical Materials*, 62, 543-552, **2016**, doi:10.1016/j.optmat.2016.11.021
IF = 2.238, IF₅ = 2.209, MNISW = 35 pkt
- [P2] P. Zassowski, S. Golba, Ł. Skorka, G. Szafraniec-Gorol, M. Matussek, **D. Zych**, W. Danikiewicz, S. Krompiec, M. Łapkowski, A. Slodek*, W. Domagała*, "Spectroelectrochemistry of alternating ambipolar copolymers of 4,4'- and 2,2'-bipyridine isomers and quaterthiophene", *Electrochimica Acta*, 231, 437-452, **2017**, doi:10.1016/j.electacta.2017.01.076
IF = 5.116, IF₅ = 4.857, MNISW = 40 pkt
- [P3] **D. Zych***, Ł. Stańczyk, I. Kalisz, K. Żak, E. Pankalla, "New methods for determination of composition of urea-ammonium nitrate solution - control of the final product", *International Journal of Research in Chemistry and Environment*, 7, 4, 23-27, **2017**
- [P4] **D. Zych***, A. Slodek, M. Matussek, M. Filapek, G. Szafraniec-Gorol, S. Maślanka, S. Krompiec, S. Kotowicz, E. Schab-Balcerzak, K. Smolarek, S. Maćkowski, M. Olejnik, W. Danikiewicz, "4'-Phenyl-2,2':6',2"-terpyridine derivatives-synthesis, potential application and the influence of acetylene linker on their properties", *Dyes and Pigments*, 146, 331-343, **2017**, doi.org/10.1016/j.dyepig.2017.07.030

IF = 3.767, IF₅ = 3.572, MNISW = 40 pkt

- [P5] **D. Zych***, A. Slodek, M. Pająk, S. Krompiec, G. Spólnik, W. Danikiewicz, "*Mono- and diruthenium, symmetrical and unsymmetrical complexes bridged by pyrene derivative - experimental and theoretical studies*", *European Journal of Inorganic Chemistry*, 3868-3877, **2017**, doi:10.1002/ejic.201700621
IF = 2.507, IF₅ = 2.381, MNISW = 35 pkt
- [P6] S. Krompiec*, B. Marcol, **D. Zych**, A. Kurpanik, W. Danikiewicz, M. Matussek, N. Kuźnik, "*Crown Ether Base: Highly Active, Regioselective and Reusable Catalytic Systems for Double Bond Migration in Allylic Compounds*", *ChemistrySelect*, 2, 6717-6727, **2017**, doi:10.1002/slct.201700904
IF = 1.505
- [P7] **D. Zych***, A. Slodek, M. Matussek, M. Filapek, G. Szafraniec-Gorol, S. Krompiec, S. Kotowicz, M. Siwy, E. Schab-Balcerzak, K. Bednarczyk, M. Libera, K. Smolarek, S. Maćkowski, W. Danikiewicz, "*Highly Luminescent 4'-(4-ethynylphenyl)-2,2';6',2''-Terpyridine Derivatives as Materials for Potential Applications in Organic Light Emitting Diodes*", *ChemistrySelect*, 2, 8221-8233, **2017**, doi:10.1002/slct.201701415
IF = 1.505
- [P8] **D. Zych***, A. Kurpanik, A. Slodek, A. Maroń, M. Pająk, G. Szafraniec-Gorol, M. Matussek, S. Krompiec, E. Schab-Balcerzak, S. Kotowicz, M. Siwy, K. Smolarek, S. Maćkowski, W. Danikiewicz, "*New NCN-coordinating ligands based on pyrene structure with potential application in organic electronics*", *Chemistry - A European Journal*, 23, 15746-15758, **2017**, doi:10.1002/chem.201703324
IF = 5.160, IF₅ = 4.950, MNISW = 40 pkt
- [P9] **D. Zych***, A. Slodek, S. Golba, S. Krompiec, "*Cyclometalated ruthenium, osmium and iridium complexes bridged by an NCN-pyrene-NCN derivative - synthesis and comparison of optical, thermal, and electrochemical properties*", *European Journal of Inorganic Chemistry*, 1581-1588, **2018**, doi:10.1002/ejic.201800011
IF = 2.578, IF₅ = 2.301, MNISW = 35 pkt
- [P10] **D. Zych***, A. Slodek, S. Krompiec, K. Malarz, A. Mrozek-Wilczkiewicz, R. Musioł*, "*4'-Phenyl-2,2':6',2''-terpyridine Derivatives Containing 1-Substituted-2,3-Triazole Ring: Synthesis, Characterization and Anticancer Activity*", *ChemistrySelect*, 3, 7009-7017, **2018**, doi.org/10.1002/slct.201801204
IF = 1.716, IF₅ = 1.716

- [P11] **D. Zych***, A. Slodek, D. Matuszczyk, S. Golba, "*Comprehensive Study of Mononuclear Osmium Complexes with Various Pyrene Ligands*", *European Journal of Inorganic Chemistry*, 47, 5117-5128, **2018**, doi.org/10.1002/ejic.201801199
IF = 2.578, IF₅ = 2.301, MNISW = 35 pkt
- [P12] G. Szafraniec-Gorol*, A. Slodek, **D. Zych**, M. Filapek, W. Ignasiak, A. Maroń, K. Leszczynska-Sejda, A. Chrobok, S. Krompiec, "*Luminescent N^CN cyclometalated iridium(III) acetylide complexes with fluorene and carbazole motifs*", *Journal of Luminescence*, 211C, 446-456, **2019**, doi.org/10.1016/j.jlumin.2019.03.033
IF = 3.280, IF₅ = 2.824, MNISW = 70 pkt
- [P13] A. Slodek*, **D. Zych**, A. Maroń, J. G. Małecki, S. Golba, G. Szafraniec-Gorol, M. Pająk, "*Does the length matter? - Synthesis, photophysical, and theoretical study of novel quinolines based on carbazoles with different length of alkyl chain*", *Dyes and Pigments*, 160, 604-613, **2019**, doi.org/10.1016/j.dyepig.2018.08.048
IF = 4.613, IF₅ = 3.881, MNISW = 100 pkt
- [P14] Slodek*, **D. Zych**, A. Maroń, S. Golba, E. Schab-Balcerzak, H. Janeczek, M. Siwy, S. Maćkowski, "*Fluorene vs carbazole substituent at quinoline core toward organic electronics*", *Dyes and Pigments*, 166, 98-106, **2019**, doi.org/10.1016/j.dyepig.2019.03.032
IF = 4.613, IF₅ = 3.881, MNISW = 100 pkt
- [P15] A. Slodek*, **D. Zych**, S. Golba, S. Zimosz, P. Gnida, E. Schab-Balcerzak, "*Dyes based on the system: D/A-acetylene linker-phenothiazine for developing efficient dye-sensitized solar cells*", *Journal of Materials Chemistry C*, 7, 5830-5840, **2019**, doi.org/10.1039/C9TC01727E
IF = 7.059, IF₅ = 6.404, MNISW = 140 pkt
- [P16] A. Slodek*, **D. Zych**, A. Maroń, R. Gawecki, A. Mrozek-Wilczkiewicz, K. Malarz, R. Musioł, "*Phenothiazine derivatives - synthesis, characterization, and theoretical studies with an emphasis on the solvatochromic properties*", *Journal of Molecular Liquids*, 285C, 515-525, **2019**, doi.org/10.1016/j.molliq.2019.04.102
IF = 5.065, IF₅ = 4.766, MNISW = 100 pkt

Po uzyskaniu stopnia doktora:

- [P17] **D. Zych***, "*1,3-Di(hetero)aryl-7-substituted Pyrenes - An Undiscovered Area of Important Pyrene Derivatives*", *Proceedings*, 41(1), 28, **2019**, doi.org/10.3390/ecsoc-23-06470

- [P18] **D. Zych***, A. Slodek, D. Zimny, S. Golba, K. Malarz, A. Mrozek-Wilczkiewicz, *"Influence of the substituent D/A at 1,2,3-triazole ring on novel terpyridine derivatives - synthesis and properties"*, RSC Advances, 9, 16554-16564, **2019**, doi.org/10.1039/c9ra02655j
IF = 3.119, IF₅ = 3.098, MNISW = 100 pkt
- [P19] **D. Zych***, A. Slodek, *"Acceptor- π -Acceptor-Acceptor/Donor systems containing dicyanovinyl acceptor group with substituted 1,2,3-triazole motif – synthesis, photophysical and theoretical studies"*, Journal of Molecular Structure, 1204, 127488, **2020**, doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127488
IF = 3.196, IF₅ = 2.618, MNISW = 70 pkt
- [P20] **D. Zych***, A. Slodek, J. G. Małecki, *"2,2':6',2''-Terpyridine derivative with tetrazole motif and its analogues with 2-pyrazinyl or 2-thiazolyl substituents - experimental and theoretical investigations"*, Journal of Molecular Structure, 1205, 127669, **2020**, doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127669
IF = 3.196, IF₅ = 2.618, MNISW = 70 pkt
- [P21] K. Malarz*, **D. Zych**, M. Kuczak, R. Musioł, A. Mrozek-Wilczkiewicz*, *"Anticancer activity of 4'-phenyl-2,2':6',2''-terpyridines - behind the metal complexation"*, European Journal of Medicinal Chemistry, 189, 112039, **2020**, doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.112039
IF = 6.514, IF₅ = 6.099, MNISW = 140 pkt
- [P22] **D. Zych***, A. Slodek, *"Sensitizers for DSSC containing triazole motif with acceptor/donor substituents – correlation between theoretical and experimental data in prediction of consistent photophysical parameters"*, Journal of Molecular Structure, 1207, 127771, **2020**, doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127771
IF = 3.196, IF₅ = 2.618, MNISW = 70 pkt
- [P23] A. Slodek*, **D. Zych**, G. Szafraniec-Gorol, P. Gnida, M. Vasylieva, E. Schab-Balcerzak*, *"Investigations of new phenothiazine-based compounds for dye-sensitized solar cells with theoretical insight"*, Materials, 13(10), 2292, **2020**, doi:10.3390/ma13102292
IF = 3.623, IF₅ = 3.920, MNISW = 140 pkt
- [P24] S. Sambathkumar*, **D. Zych**, E. Kavitha, P. Ramesh, R. Jagatheesan, *"Theoretical investigations on the electronic absorption properties of phenothiazine based organic materials for dye-sensitized solar cells"*, Materials Today: Proceedings, 47, 1937-1941, **2021**, doi.org/10.1016/j.matpr.2021.03.715
CiteScore = 2.3

- [P25] K. Malarz*, **D. Zych**, R. Gawecki, M. Kuczak, R. Musioł, A. Mrozek-Wilczkiewicz*, "New derivatives of 4'-phenyl-2,2':6',2''-terpyridine as promising anticancer agents", *European Journal of Medicinal Chemistry*, 212, 113032, **2021**, doi.org/10.1016/j.ejmech.2020.113032
IF = 7.088, IF₅ = 6.427, MNISW = 140 pkt
- [P26] A. Slodek*, **D. Zych**, S. Kotowicz, G. Szafraniec-Gorol, S. Zimosz, E. Schab-Balcerzak, M. Siwy, J. Grzelak, S. Maćkowski, "Small in size but mighty in force" – the first principle study of the impact of A/D units in A/D-phenyl- π -phenothiazine- π -dicyanovinyl systems on photophysical and optoelectronic properties", *Dyes and Pigments*, 189, 109248, **2021**, doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109248
IF = 5.122, IF₅ = 4.360, MNISW = 100 pkt
- [P27] G. Szafraniec-Gorol*, A. Slodek, **D. Zych**, M. Vasylieva, M. Siwy, K. Sulowska, S. Maćkowski, I. Taydakov, D. Goriachiye, E. Schab-Balcerzak, "Impact of donor structure in new D- π -A systems based on indolo[3,2,1-jk]carbazoles on thermal, electrochemical, optoelectronic and luminescence properties", *Journal of Materials Chemistry C*, 9, 7351-7362, **2021**, doi.org/10.1039/D1TC01208H
IF = 8.067, IF₅ = 7.642, MNISW = 140 pkt
- [P28] S. Zimosz, A. Slodek, P. Gnida, A. Glinka, M. Ziótek*, **D. Zych**, A. K. Pająk, M. Vasylieva, E. Schab-Balcerzak*, "New D- π -D- π -A Systems Based on Phenothiazine Derivatives with Imidazole Structures for Photovoltaics", *Journal of Physical Chemistry C*, 126, 8986-8999, **2022**, doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c01697
IF = 3.7, IF₅ = 3.9, MNISW = 140 pkt
- [P29] S. Zimosz*, **D. Zych**, G. Szafraniec-Gorol, S. Kotowicz, K. Malarz, R. Musioł, A. Slodek*, "Does the change in the length of the alkyl chain bring us closer to the compounds with the expected photophysical and biological properties? – studies based on D- π -D-A imidazole-phenothiazine system", *Journal of Molecular Liquids*, 365, 120076, **2022**, doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120076
IF = 6.0, IF₅ = 5.6, MNISW = 100 pkt
- [P30] P. Gnida, S. Zimosz, A. Glinka, M. Ziótek*, **D. Zych**, S. Kotowicz, M. Faisal Amin, P. Chulkin, G. Kulesza-Matlak, A. Slodek*, E. Schab-Balcerzak*, "Unexpected Impact of N-Alkyl Chain Length in Bis-2-cyanoacrylic Acid Substituted Phenothiazines on the Photovoltaic Response of DSSCs", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 63, 16, 7133-7153, **2024**, doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00045
IF = 3.8, IF₅ = 3.8, MNISW = 140 pkt

2. Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.

Przed uzyskaniem stopnia doktora:

Prezentacje ustne:

- 1. 15-16.09.2016** Wrocław - III Ogólnopolska Konferencja Młodych Naukowców Nauk Przyrodniczych "Wkraczając w świat nauki 2016", *"Synteza i właściwości pochodnych 2,2';6',2"-terpirydyny oraz binuklearnych związków kompleksowych mostkowanych pochodnymi pirenu"* - **I. miejsce w konkursie na najlepszy referat**
- 2. 21-23.10.2016** Szklarska Poręba - IV Konferencja Laureatów Diamentowego Grantu, *"Synteza i właściwości pochodnych 2,2';6',2"-terpirydyny oraz monometalicznych mono- i binuklearnych związków kompleksowych mostkowanych pochodnymi pirenu"*
- 3. 01-02.04.2017** Wrocław - VI Wrocławska Konferencja Studentów Nauk Technicznych i Ścisłych Puzzel, *"Synteza i właściwości monometalicznych mono- i binuklearnych związków kompleksowych mostkowanych pochodnymi pirenu"* - **II. miejsce w konkursie na najlepszy referat**
- 4. 28-30.06.2017** Toruń - XI Copernican International Young Scientists Conference, konferencja międzynarodowa, *"Synthesis and properties of biscyclometalated ruthenium, osmium and iridium complexes bridged by 1,3,6,8-tetrasubstituted pyrenes"*
- 5. 12-14.10.2017** Macedonia, Skopje - EastWest Chemistry Conference, *"Synthesis and properties of ruthenium, osmium and iridium complexes bridged by new NCN-coordinating ligands based on pyrene structure"*
- 6. 12-14.10.2017** Macedonia, Skopje - XII Students' Congress of Society of Chemists and Technologists of Macedonia, *"4'-Phenyl-2,2';6',2"-terpyridine derivatives - synthesis, potential application and the influence of acetylene linker on their properties"*
- 7. 18.11.2017** Poznań - IV Poznańskie Sympozjum Młodych Naukowców, *"Mono- i bimetaliczne, symetryczne i niesymetryczne kompleksy mostkowane pochodnymi pirenu - synteza i właściwości"*
- 8. 10-11.05.2018** Łódź - VI Łódzkie Sympozjum Doktorantów Chemii, *"NCN-cyklometalujące ligandy pirenowe oraz ligandy tridentne w syntezie mono- i binuklearnych związków kompleksowych"*

9. **04-07.09.2018** Portugalia, Lizbona - 7th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands, "*NCN-coordinating ligands based on pyrene structure and NNN-ligands in the synthesis of mono- and binuclear complexes*"
10. **19-22.09.2018** Macedonia, Ochryda - 25th Congress of Society of Chemists and Technologists of Macedonia, "*Symmetrical and unsymmetrical NCN-coordinating ligands based on pyrene structure - synthesis and characterization*"
11. **10-11.10.2018** Ukraina, Lwów - Conference of Young Scientists at EastWest Chemistry Conference-2018, "*Disubstituted pyrene derivatives - differences caused by the way of substitution: experimental and theoretical studies*" - **nagroda za najlepszy referat**

Postery (jako autor prezentujący):

1. **27.09.2013**, Chorzów - II ogólnopolska konferencja naukowa pt. „Pomiędzy Naukami – zjazd fizyków i chemików”, "*Nowe materiały molekularne i makromolekularne dla organicznej elektroniki zawierające motyw bitiofenowy*"
2. **07.12.2013** Łódź - Zjazd Zimowy Sekcji Studenckiej PTChem, "*Wykorzystanie reakcji sprzęgania Sonogashiry w syntezie monomerów nowych politiofenów*"
3. **11-12.09.2014** Wrocław - I Ogólnopolska Konferencja Młodych Naukowców Nauk Przyrodniczych "Wkraczając w świat nauki 2014", "*Synteza 1,4-bis(2,2'-bitiofen-5-ylo)-1,3-butadiynu, czyli od pomysłu do zgłoszenia patentowego*"
4. **14-18.09.2014** Częstochowa - 57. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego oraz Stowarzyszenia Inżynierów i Techników Przemysłu Chemicznego, "*Wykorzystanie reakcji sprzęgania Sonogashiry w syntezie nowych pochodnych zawierających motyw bitiofenowy*"
5. **26.09.2014** Chorzów - III ogólnopolska konferencja naukowa pt. "Pomiędzy Naukami – zjazd fizyków i chemików", "*Synteza tetrapodstawionych fluorantenów z motywem bitiofenowym na drodze cykloaddycji [2+2+2]*"
6. **13.12.2014** Wrocław - Zjazd Zimowy Sekcji Studenckiej PTChem, "*Dipodstawione motywami bitiofenowymi pochodne acetyleny i 1,3-butadiynu otrzymywane na drodze sprzęgania Sonogashiry*"
7. **25-28.03.2015** Niemcy, Münster - 17th Frühjahrssymposium – spring symposium, "*New substituted acetylene derivatives and an innovative method of their synthesis*"

8. **24.09.2015** Niemcy, Berlin - Conference in Zentrum für Materialien und Energie GmbH, *"Synthesis and characterization of candidate thermoelectric zinc aluminate and derivatives"*
9. **12-13.05.2016** Łódź - IV Łódzkie Sympozjum Doktorantów Chemii, *"Binuklearne monometaliczne związki kompleksowe mostkowane pochodną pirenu"*
10. **16.09.2016** Chorzów - V ogólnopolska konferencja naukowa pt. "Pomiędzy Naukami – zjazd fizyków i chemików", *"Monometaliczne mono- i binuklearne związki kompleksowe mostkowane pochodnymi pirenu"*
11. **19-23.09.2016** Poznań - 59. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, *"Binuklearne monometaliczne związki kompleksowe typu [(tpy)M(NCN-piren-NCN)M(tpy)]"*
12. **17.12.2016** Lublin - Zjazd Zimowy SSPTChem 2016, *"Synteza i właściwości nowych pochodnych 4'-(4-etynylofenylo)-2,2';6',2"-terpirydyny"*
13. **28-30.06.2017** Toruń - XI Copernican International Young Scientists Conference, konferencja międzynarodowa, *"Highly luminescence 4'-(4-ethynylphenyl)-2,2';6',2"-terpyridine derivatives - synthesis and properties"*
14. **15.09.2017** Chorzów - VI ogólnopolska konferencja naukowa "Pomiędzy Naukami", *"Binuklearne związki kompleksowe rutenu, osmu i irydu mostkowane pochodnymi pirenu"*
15. **09-10.11.2017** Bydgoszcz - Zjazd Zimowy SSPTChem 2017, *"NCN-cyklometalujące ligandy pirenowe jako mostki w kompleksach metali"*

Po uzyskaniu stopnia doktora:

Prezentacje ustne:

1. **12.12.2020** Indie, Tamil Nadu - International Virtual Conference on "Recent Advances in Chemical Sciences" (iCRACS 2020 (virtual)) Organized by PG and Research Department of Chemistry, Vivekanandha College of Arts and Sciences for Women (Autonomous), *"Chemistry of Pyrene Derivatives: Never-ending Story in Obtaining of Promising Materials to Various Applications"* - wykład inauguracyjny na zaproszenie
2. **18-19.09.2021** Gdańsk - III Pomorskie Studenckie Sympozjum Chemiczne *"Wpływ sposobu podstawienia liganda pirenowego na właściwości tworzonych przez niego związków koordynacyjnych osmu"*

3. **11-16.09.2022** Lublin - 64. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, *"Wpływ sposobu podstawienia pirenu w obszarze non-K na właściwości fotofizyczne w projektowaniu wydajnych fluoroforów"* - **wykład sekcyjny**
4. **28.11.2022** Wrocław - Seminarium Chemii Fizycznej i Teoretycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, *"Mono-, di-, tri-, tetra- podstawione pireny w obszarze węzłowym i non-K - jako świadome wpływanie na właściwości fotofizyczne w projektowaniu i otrzymywaniu wydajnych fluoroforów"* - **wykład na zaproszenie**
5. **15.09.2023** Wrocław - VII Ogólnopolska Konferencja Młodych Naukowców „Wkraczając w świat nauki 2023”, *"Czy wkraczanie w świat nauki byłoby łatwiejsze, gdyby odbywało się z perspektywy jej historii? – Omówienie na przykładzie realizacji projektu z historii chemii"*
6. **18-22.09.2023** Toruń - 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, *"Poznanie chemii z perspektywy historii jako metoda przełamująca stereotyp niedostępnej nauki i wzbogacająca prezentację wiedzy naukowej"* - **wykład sekcyjny**

Postery (jako autor prezentujący)

1. **15.11-15.12.2019** - The 23rd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry, *"1,3-Di(hetero)aryl-7-substituted pyrenes – an undiscovered area of important pyrene derivatives"*
 2. **24.05.2024** - Obchody 60-lecia Chemii oraz 5-lecia Farmacji w Opolu, *"Nieważne czy żółtam czy zielona, ważne, że zrównoważona (chemia)"*
3. **Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.**
1. **10.12.2022** Opole - Zjazd Zimowy Sekcji Młodych Polskiego Towarzystwa Chemicznego (pomoc w organizacji)
 2. **20-21.04.2024** Baltic Natural Sciences Conference (NSBC), członek Komitetu Naukowego
4. **Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.**

Będące w trakcie realizacji:

- **2024 – 2027** SONATA, Narodowe Centrum Nauki, 2023/51/D/ST5/00369 *"Odkrywanie pochodnych azapirenow jako strukturalnego izosteru pirenu: innowacyjne podejścia do syntezy i charakterystyki materiałów funkcjonalnych w kierunku wydajnych fluoroforów a także emiterów światła białego"*, 1 418 680 PLN
Pełniona funkcja: kierownik projektu
- **2024 – 2025** RSC Research Fund Grant R23-6934294260, Royal Society of Chemistry, *"Exploring Synthesis Strategies and Substitution Approaches for Terpyridine Analogues Containing Azoles for the Development of Potent Anticancer Agents"*, 5 000 GBP
Pełniona funkcja: kierownik projektu
- **2024 – 2025** RSC Sustainable Laboratories Grant L23-9677800463, Royal Society of Chemistry, *"It does not matter if it is green, blue, purple, or colourful, what matters is sustainable chemistry - the end of theory and grand concepts - it is time for practical actions in a modern and sustainable laboratory"*, 10 000 GBP
Pełniona funkcja: kierownik projektu
- **2024 – 2025** Studenckie koła naukowe tworzą innowacje, SKN/SP/601926/2024, Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, *"Synteza i charakterystyka związków termoczulych, czyli badania w kontekście innowacyjnych materiałów do zastosowań w pomiarach temperatury"*, kwota: 70 000 PLN
Pełniona funkcja: kierownik projektu

Zrealizowane:

- **2022 – 2023** Inclusion and Diversity Fund, Royal Society of Chemistry, *"Exploring chemistry from a historical perspective as a method that breaks the stereotype of inaccessible science and enriches the presentation of scientific knowledge"*, 5000 GBP
Pełniona funkcja: kierownik projektu
- **2022 – 2023** Grant obliczeniowy nr 568, Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe, *"Obliczenia kwantowo-chemiczne jako komplementarne narzędzie w projektowaniu, otrzymywaniu oraz badaniu nowych fluoroforów opartych na strukturze policyklicznych węglowodorów aromatycznych"*
Pełniona funkcja: kierownik projektu
- **2018 – 2019** ETIUDA 6 finansowana przez Narodowe Centrum Nauki nr umowy 2018/28/T/ST5/00005 *"NCN-cyklometalujące ligandy pirenowe oraz ligandy tridentne w syntezie mono- i binuklearnych związków kompleksowych"*, 109 352 PLN
Pełniona funkcja: kierownik projektu

- **2015 – 2019** „Diamentowy Grant” finansowany przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego nr umowy 0215/DIA/2015/44 *"Binuklearne mono- i bimetaliczne związki kompleksowe mostkowane pochodnymi pirenu - synteza i właściwości"*, 200 000 PLN
Pełniona funkcja: kierownik projektu
- **2016 – 2018** Grant badawczy OPUS finansowany przez Narodowe Centrum Nauki nr umowy 2016/21/B/ST5/00805 *"Cykloaddycja Dielsa-Aldera pod wysokim ciśnieniem: nowe reakcje, nowe zastosowania"*, 790 000 PLN
Pełniona funkcja: wykonawca
- **2014 – 2016** Grant badawczy finansowany przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju nr umowy PBS2/A5/40/2014 *"Innowacyjne materiały i nanomateriały z polskich źródeł renu i metali szlachetnych dla katalizy, farmacji i organicznej elektroniki"*, 8 550 000 PLN
Pełniona funkcja: wykonawca
- **2011 – 2014** Grant badawczy OPUS finansowany przez Narodowe Centrum Nauki nr 2011/01/B/ST5/06309 *"Etynylobitiofen: uniwersalny reagent do syntez nowych układów karbo- i heterocyklicznych, nowych kompleksów metali, oraz nowych poliofenów o oczekiwanych właściwościach"*, 360 000 PLN
Pełniona funkcja: wykonawca

5. Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.

- **od 2013** Członek Polskiego Towarzystwa Chemicznego (nr członkowski: 991890)
- **od 2022** Członek The Royal Society of Chemistry (MRSC) (Member ID: 734987)

6. Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.

- **01.06.2019 - 30.11.2019** PostDoc, Institute Silicon Photovoltaics, Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie GmbH, Berlin, Niemcy
- **01.10.2015 - 31.12.2015** Staż w ramach programu *"Budujemy wartość polskiej gospodarki. Pracuj dla nas!"* w Grupa Azoty Zakłady Azotowe Kędzierzyn-Koźle S.A.
- **03.08.2015 - 25.09.2015** Staż zagraniczny w ramach letniego programu studenckiego w Helmholtz-Zentrum für Materialien und Energie GmbH, Berlin, Niemcy

- **28.01.2015 - 27.02.2015** Staż zagraniczny w ramach programu Partnerstwo-Aktywizacja-Staże (PAS) w UBICHEM Research Ltd., Budapeszt, Węgry

7. Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).

- Crystals MDPI - Special Issue "*Coordination Compounds with (Hetero)Aromatic Bridging Ligands*", Guest Editors: Prof. Yu-Wu Zhong, Dr. Dawid Zych (4 opublikowane prace), 2020/2021
- Crystals MDPI - Special Issue "*Coordination Compounds with (Hetero)Aromatic Bridging Ligands Volume II*", Guest Editor: Dr. Dawid Zych, 2022/2023
- Frontiers in Chemistry - Research Topic "*Density Functional Theory as a Tool for Materials Discovery for Dye-sensitized Solar Cells*" Guest Editors: Dr. Dawid Zych, Dr. Aneta Slodek, Dr. A-Reza Nekoei, 2022/2023
- Frontiers in Chemistry - Review Editor for Inorganic Chemistry
- Frontiers in Chemistry - Guest Associate Editor in Theoretical and Computational Chemistry
- Crystals MDPI - Topic Board, Topical Advisory Panel for section 'Organic Crystalline Materials'
- Molbank MDPI - Reviewer Board
- MDPI - Reviewer Board Member
- IOP Publishing - Trusted Reviewer
- Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, IOP Publishing – Outstanding Reviewer Awards 2020

8. Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.

389 recenzji artykułów naukowych + 1 recenzja jako Edytor w SI (Crystals):

- ELSEVIER**
- Coordination Chemistry Reviews (2 recenzje)
 - Journal of Molecular Structure (112 recenzji)

- Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy (2 recenzje)
- Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry (8 recenzji)
- Chemical Physics Letters (2 recenzje)
- Dyes and Pigments (6 recenzji)
- Computational Materials Science (3 recenzje)
- Materials Science in Semiconductor Processing (2 recenzje)
- Results in Chemistry (6 recenzji)
- Heliyon (5 recenzji)
- Computational and Theoretical Chemistry (6 recenzje)

ACS • ACS Organic & Inorganic Au (1 recenzja)

- WILEY-VCH**
- European Journal of Organic Chemistry (4 recenzje)
 - ChemPhysChem (2 recenzje)
 - Applied Organometallic Chemistry (2 recenzje)
 - Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie (2 recenzje)
 - ChemistrySelect (2 recenzje)
 - International Journal of Quantum Chemistry (1 recenzja)

- IOP Publishing**
- Materials Research Express (7 recenzji)
 - IOP SciNotes (2 recenzje)
 - Journal of Physics B Atomic, Molecular and Optical Physics (5 recenzji)
 - Journal of Physics D: Applied Physics (2 recenzje)
 - Physica Scripta (2 recenzje)

- MDPI**
- International Journal of Molecular Sciences (3 recenzje)
 - Molbank (2 recenzje)
 - Energies (29 recenzji)
 - Molecules (9 recenzji)
 - Crystals (8 recenzji)
 - Coatings (8 recenzji)
 - Sustainability (1 recenzja)
 - Polymers (3 recenzje)
 - Materials (35 recenzji)
 - ChemEngineering (2 recenzje)
 - Electronics (6 recenzji)
 - Symmetry (2 recenzje)
 - Photochem (2 recenzje)
 - Chemistry (2 recenzje)
 - Batteries (2 recenzje)

- Applied Sciences (5 recenzji)
- Vaccines (2 recenzje)
- Nanomaterials (7 recenzji)
- World Electric Vehicle Journal (1 recenzja)
- Hydrogen (2 recenzje)
- Processes (2 recenzje)
- Pharmaceutics (1 recenzja)

- Springer**
- Macromolecular Research (2 recenzje)
 - Research on Chemical Intermediates (2 recenzje)
 - Molecular Diversity (9 recenzji)
 - Journal of Materials Science: Materials in Electronics (2 recenzje)

- Inne**
- Scientific Reports, Nature Portfolio (1 recenzja)
 - Journal of Coordination Chemistry, Taylor & Francis (4 recenzje)
 - Open Chemistry, De Gruyter (20 recenzji)
 - Chemistry Letters, Chemical Society of Japan (1 recenzja)
 - Journal of Materials Informatics, OAE Publishing Inc. (2 recenzje)
 - Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (26 recenzji)

9. Wykaz uczestnictwa w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, wnioski o przyznanie nagród naukowych, wnioski w innych konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny.

- **2023** Francja - AAPG 2023; panel CE29 – Analytical chemistry, theoretical chemistry and modeling; Agence Nationale de la Recherche (ANR, French National Research Agency); The French Institute for International and Strategic Affairs (IRIS)
- **2023** Wielka Brytania, Researcher Collaborations Grant (Royal Society of Chemistry)
- **2023** Hiszpania, IDEAL the IMDEA Nanociencia postdoctoral fellowships programme in nanoscience supported by the Marie Skłodowska-Curie Actions (HORIZON-MSCA-2022-COFUND)

III. WSPÓLPRA Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

1. Wykaz uzyskanych praw własności przemysłowej, w tym uzyskanych patentów krajowych lub międzynarodowych.

przed uzyskaniem stopnia doktora:

1. Pat.223098; S. Krompiec, I. Grudzka, **D. Zych** (30%), "Sposób otrzymywania 1,4-bis(2,2'-bitiofen-5-ylo)-1,3-butadiynu", data udzielenia patentu: 02.12.2015

2. Pat.228983; K. Leszczyńska-Sejda, G. Benke, J. Malarz, M. Ciszewski, M. Drzazga, G. Machelska, K. Witman, S. Krompiec, **D. Zych** (5%), M. Filapek, "*Sposób wytwarzania bezwodnego renianu(VII) chromu(III)*", data udzielenia patentu: 11.12.2017
3. Pat.228987; G. Benke, K. Leszczyńska-Sejda, J. Malarz, M. Ciszewski, M. Drzazga, G. Machelska, K. Witman, **D. Zych** (3,5%), M. Matussek, A. Szłapa-Kula, S. Kula, C. Pietraszuk, P. Żak, "*Sposób wytwarzania renianu(VII) tetraaminapalladu(II)*", data udzielenia patentu: 12.12.2017
4. Pat.231874; S. Krompiec, B. Marcol, **D. Zych** (10%), A. Kurpanik, K. Leszczyńska-Sejda "*Sposób otrzymywania związków 1-propenyłowych typu $QCH=CHCH_3$, zwłaszcza wysokowrzęcych*", data udzielenia patentu: 14.12.2018
5. Pat.232054; P. Żak, M. Bolt, J. Lorkowski, C. Pietraszuk, G. Benke, K. Leszczyńska-Szojda, A. Słodek, **D. Zych** (7,5%), "*Sposób otrzymywania (E)-1,4-dipodstawionych symetrycznych 1,3-enynów*", data udzielenia patentu: 19.12.2018
6. Pat.233037; P. Żak, M. Bolt, J. Lorkowski, C. Pietraszuk, G. Benke, K. Leszczyńska-Szojda, A. Słodek, **D. Zych** (7,5%), "*Kompleksy platyny(0) zawierające N-heterocykliczne ligandy karbenowe i ich zastosowanie*", data udzielenia patentu: 10.05.2019

po uzyskaniu stopnia doktora:

7. Pat.234138; **D. Zych** (45%), M. Matussek, S. Krompiec, K. Pożoga, A. Kurpanik, "*Pochodne antracenu w postaci 9-alkoksy-10-bromoantracenów oraz sposób ich otrzymywania*", data udzielenia patentu: 19.09.2019
8. Pat.230876; S. Krompiec, A. Szłapa, S. Kula, M. Matussek, M. Filapek, **D. Zych** (10%), K. Leszczyńska-Sejda, G. Benke, B. Marcol, "*Sposób otrzymywania 1,2-bis(fluorenowych) pochodnych acetylenu*", data udzielenia patentu: 07.11.2019
9. Pat.228388; S. Krompiec, A. Szłapa, S. Kula, M. Filapek, **D. Zych** (15%), K. Leszczyńska-Sejda, G. Benke, B. Marcol, "*Sposób otrzymywania 1,2-bis(N-alkilokarbazol-3-ylo)acetylenów*", data udzielenia patentu: 07.11.2019
10. Pat.234525; M. Pająk, A. Kurpanik, **D. Zych** (20%), S. Krompiec, M. Matussek, B. Marcol, M. Filapek, "*Sposób otrzymywania 1',2'-bis(metoksykarbonylo)-1,12-benzoperylenu lub 1',2'-bis(etoksykarbonylo)-1,12-benzoperylenu*", data udzielenia patentu: 07.11.2019

11. Pat.235530; **D. Zych** (50%), S. Krompiec, A. Kurpanik, K. Leszczyńska-Sejda, G. Benke, J. Malarz, *"Nowe pochodne 4-alkoksy-2-bromopirydyny i sposób ich otrzymywania"*, data udzielenia patentu: 23.04.2020
12. Pat.235529; **D. Zych** (50%), S. Krompiec, A. Kurpanik, K. Leszczyńska-Sejda, G. Benke, J. Malarz, *"Nowe pochodne 4-alkoksy-2-bromopirydyny i sposób ich otrzymywania"*, data udzielenia patentu: 23.04.2020
13. Pat.236066; S. Krompiec, B. Marcol, **D. Zych** (25%), K. Leszczyńska-Sejda, G. Benke, J. Malarz, *"Jednoetapowy sposób otrzymywania 3,4,5-tripodstawionych izoksazolin"*, data udzielenia patentu: 07.07.2020
14. Pat.236820; **D. Zych** (35%), A. Słodek, S. Krompiec, K. Malarz, A. Mrozek-Wilczkiewicz, R. Musioł, *"Pochodne 2,2':6',2"-terpirydyny, sposób ich otrzymywania oraz ich zastosowanie do wytwarzania leków przeznaczonych do leczenia nowotworów"*, data udzielenia patentu: 10.08.2020
15. Pat.237154; **D. Zych** (45%), M. Matussek, S. Krompiec, K. Pożoga, A. Kurpanik, *"Pochodne antracenu w postaci 9-alkoksy-10-bromoantracenów oraz sposób ich otrzymywania"*, data udzielenia patentu: 25.11.2020
16. Pat.243880; A. Słodek, K. Malarz, S. Zimosz, R. Musioł, **D. Zych** (5%), G. Szafraniec-Gorol, *"Symetryczne pochodne fenotiazyny oraz ich zastosowanie"*, data udzielenia patentu: 20.10.2023

IV. DANE NAUKOMETRYCZNE

1. **Impact Factor:** 152.214
2. **Liczba wszystkich cytowań:** 617 (Scopus), 582 (Web of Science), 691 (Google Scholar)
3. **Liczba cytowań bez autocytowań:** 443 (Scopus)
4. **Indeks Hirscha:** 16 (Scopus), 16 (Web of Science), 17 (Google Scholar)

Podpisane elektronicznie przez Dawid Mariusz
Zych (Certyfikat kwalifikowany) w dniu
2024-06-28.
.....

(podpis wnioskodawcy)