

Szybki rozwój nowych technologii, prowadzących do miniaturyzacji urządzeń wykorzystywanych w życiu codziennym (tzn. układów scalonych lub technologii optycznego przesyłania informacji), jak również perspektywy nowych technologii (jak na przykład układów scalonych opartych na cząsteczkach organicznych czy budowa memristorów) powoduje ogromne zainteresowanie badaniami podstawowymi w nanoskali. Działalność naukowa grupy składającej obecny projekt, dotyczy różnych aspektów współczesnej inżynierii materiałowej i właściwości nanoskopowych systemów materiałowych. Prace badawcze obejmują niektóre z najnowszych metod i najgorętszych tematów w szybko rozwijającej się dziedzinie. Tematyka badań materiałów, które są powiązane z ich właściwościami w nanoskali, koncentruje się na metodach skaningowej mikroskopii bliskich oddziaływań i mikroskopii elektronowej.

Celem projektu jest badanie korelacji pomiędzy rodzajem defektów strukturalnych i elektronowych, w skali atomowej, powierzchni kryształów $\text{TiO}_2(110)$, powstających w wyniku różnych metod preparatyki tychże powierzchni, a docelowo charakterem interfejsu wzrastających na tych powierzchniach w procesie samoorganizacji nanostruktur molekularnych.

Ditlenek tytanu jako modelowy materiał z grupy tlenków metali jest intensywnie badany ze względu na szeroką gamę zastosowań praktycznych, od katalizy poprzez powłoki ochronne i biokompatybilne, czujniki używane w optoelektronice do, intensywnie teraz prowadzonych, badań nad przełączaniem rezystywnym. W szczególności, powierzchnia (110) rutylu TiO_2 przyciąga wiele uwagi, dzięki możliwości zmieniania jej właściwości katalitycznych i elektronowych przez kontrolę powierzchniowej gęstości wakancji tlenowych w wyniku redukcji termicznej kryształu lub oddziaływania z wiązką jonową. Desorpcja atomów tlenu prowadzi do pojawienia się nowego stanu elektronowego w przerwie energetycznej, który jest związane z redystrybucją lokalnego nadmiaru ładunku na sąsiednich atomach tytanu. Warstwy molekularne, wielowarstwowe i nanostruktury wytwarzane na powierzchni ditlenku tytanu modyfikują właściwości tych powierzchni, co prowadzi do licznych zastosowań w fotowoltaice, optoelektronice, katalizie i w medycynie. Stąd badania właściwości strukturalnych, chemicznych i elektronowych struktur molekularnych utworzonych na powierzchniach TiO_2 są intensywnie prowadzone na przestrzeni ostatniej dekady.

Proponowana tematyka projektu wiąże z sobą bardzo ważne dwa aspekty badań. Z jednej strony, prowadzone będą prace dotyczące określenia w nanoskali właściwości elektronowych powierzchni (110) kryształów TiO_2 , modelowego materiału intensywnie obecnie badanego ze względu na przełączanie rezystywne, wynikających z różnych metod preparatyki otrzymywania czystych powierzchni. W fizyce ciała stałego zwłaszcza w fizyce półprzewodników często dokonuje się modyfikacji właściwości materiałów poprzez celowe wprowadzenie defektów do idealnej struktury kryształu. Dzięki takiemu zabiegowi materiały półprzewodnikowe, a w szczególności krzem, zyskały właściwości, które zrewolucjonizowały naszą cywilizację. Przyczyniły się do niespotykanego rozwoju komputerów. Jednak dla półprzewodników na bazie krzemu osiągnięto praktycznie granicę miniaturyzacji, co wymusza poszukiwania innych materiałów pozwalających na zapamiętywanie tera- i peta-bitów informacji w pamięciach komputerów. Potencjalnymi alternatywnymi materiałami są pojedyncze tlenki metali przejściowych np. ditlenek tytanu. Defekty, które istnieją w tych materiałach, w szczególności tzw. defekty jedno lub dwuwymiarowe, pozwalają stworzyć system „nano-przełączników” umożliwiających osiągnięcie wymaganej gęstości zapisu informacji. Ujścia tych rozciągniętych defektów na powierzchniach kryształów TiO_2 wpływają z kolei na niejednorodność właściwości powierzchni, w wymiarze strukturalnym jak i elektronowym. Ma to duże znaczenie na jakość uzyskiwanych struktur molekularnych, gdy pow. TiO_2 używane są jako podłoża do wzrostu tychże struktur.

I tutaj drugi aspekt proponowanych badań mianowicie określenie w jaki sposób niejednorodność podłoża z $\text{TiO}_2(110)$ wpływa na morfologię wzrastających warstw molekularnych. Jakość uzyskiwanych podkładów z kryształów TiO_2 ma ogromny wpływ na rodzaj i jakość wzrastających na nich struktur molekularnych. Większość cząsteczek organicznych wykorzystywanych do zastosowań elektronicznych to te, w których występują silne sprzężenia wiązań π (przykład liniowych molekuł oligoaceny, oligofenyly i oligotiofeny składających się z pierścieni aromatycznych). W przypadku podłoża z metalu, silne oddziaływania (nakładanie się na π -orbitali z chmurą elektronową metalicznych powierzchni) prowadzi to do horyzontalnego ułożenia molekuł czyli ich adsorpcji płasko na powierzchni. Przeciwnie jest w przypadku powierzchni dielektrycznych (jak tlenki metali), gdzie oddziaływanie z podłożem jest słabsze i oddziaływanie pomiędzy sąsiednimi molekułami może być czynnikiem decydującym o charakterze i strukturze wzrastającej warstwy molekularnej. Na przykład, na atomowo płaskiej powierzchni miki czy TiO_2 , pręto-podobne cząsteczki para-hexafenyly (6P) czy pentacenu organizują się na podłożu w pozycji horyzontalnej (oś długa ustawiona jest równoległe do powierzchni podłoża – pozycja leżąca) podczas gdy na tejże powierzchni zmodyfikowanej wiązką jonową ustawiają się prostopadle do podłoża tworząc strukturę osobnych wysp. Wydłużona molekula jest swego rodzaju „sensorem-próbnikiem” określającym lokalny charakter podłoża. Morfologia powstających struktur molekularnych na powierzchni TiO_2 jest pochodną rodzaju i siły oddziaływania molekula-podłoże i przez to może posłużyć pośrednio do oceny jakości przygotowywanych podłoży. Tworzenie się warstw molekularnych z molekuł ułożonych wertykalnie do podłoża wskazywać będzie w skali pojedynczych nanometrów na niejednorodność powierzchni. Ta kontrola ułożenia (horyzontalnego lub wertykalnego) molekuł budujących struktury molekularne ma zasadnicze znaczenie w ich zastosowaniach w budowie urządzeń elektroniki molekularnej. Budowa cienkich tranzystorów organicznych (OTFT), organicznych diod emitujących (OLED) czy baterii fotowoltaicznych (OPV) wymaga wykorzystania odpowiednich geometrii (sprzężenia) pomiędzy molekułą i podłożem. Na przykład, płaskie cząsteczki zorientowane równoległe do powierzchni elektrod są preferowane w konstrukcji OLED czy ogniw słonecznych podczas gdy ułożenie wertykalne molekuł konieczne jest do budowy OTFT. Stąd, określenie różnic w mechanizmie wzrostu cząsteczek organicznych na podłożach z natywnego ditlenku tytanu jest bardzo aktualnym tematem badań.