

Procesy samoorganizacji są zjawiskami powszechnie występującymi w przyrodzie. Obejmują one szeroką gamę różnych jednostek elementarnych, układających się w większe struktury uporządkowane. Wśród nich wyróżnić można powstawanie chromosomów z histonów i DNA czy też spontaniczne formowanie się dwuwarstwy lipidowej, działającej jako półprzepuszczalna błona w komórkach. Samoorganizacja jest również istotnym zjawiskiem, pomocnym w projektowaniu nowych materiałów znajdujących zastosowanie np. w medycynie. Z tego powodu, badano różnego rodzaju związki organiczne, które posiadały zdolność do samoorganizacji ze względu na występowanie specyficznych wiązań kierunkowych takich jak wiązania halogenowe, wodorowe, czy koordynacyjne oraz ogólnie pojęte siły van der Waalsa.

Ze względu na fakt, iż przeprowadzanie eksperymentów, w których zaadsorbowane monowarstwy związków tego pokroju tworzą struktury uporządkowane jest dość trudne, symulacje komputerowe wydają się być prostym i wygodnym substytutem w celu (i) minimalizowania kosztów tego typu badań oraz (ii) umożliwienia szybkiego rozpoznania jak dany układ może się zachowywać. Umożliwiają one również znalezienie odpowiedzi na takie zagadnienia jak mechanizm formowania się danej struktury uporządkowanej. Ponadto, dzięki symulacjom komputerowym w relatywnie szybkim czasie możliwe jest rozważanie wielu czynników, takich jak geometria cząstek, warunki termodynamiczne, rodzaj oraz siła oddziaływań międzycząsteczkowych, które mogą wpływać na efekt końcowy procesu samoorganizacji.

Głównym celem rozprawy doktorskiej było ustalenie mechanizmów, towarzyszących procesom samoorganizacji przy pomocy symulacji komputerowych metodą dynamiki molekularnej. W pewnych przypadkach zostały przeprowadzone dodatkowe symulacje metodą Monte Carlo. W trakcie badań, największa uwaga poświęcona została cząstkom o geometrii czteroramiennej oraz liniowej. Rozpatrywano również mieszaniny dwuskładnikowe cząstek liniowych z atomami metali o różnym rozmiarze. Dodatkowo, przeprowadzono uzupełniające symulacje cząstek o innej geometrii w celu zademonstrowania wszechstronności zaproponowanego w dysertacji „gruboziarnistego” modelu.

Otrzymane struktury uporządkowane były porównywane z wynikami eksperymentalnymi. Ponadto, charakteryzowane były przy pomocy wielu parametrów porządku. Stwierdzono dużą zgodność przewidywań teoretycznych z danymi literaturowymi. W związku z tym, zaproponowano alternatywny, „bardziej rzeczywisty” model, który w większym stopniu jest w stanie odzwierciedlać architekturę cząstki. We współpracy z Katedrą Chemii Organicznej i Instytutem Fizyki UMCS wykonywane są badania nad zachowaniem się 5,5'-bis(4-hydroksyfenyl)-2,2'-dihydroksy-1,1-bifenylu na powierzchniach metalicznych.