

Przedstawiona rozprawa doktorska koncentruje się na badaniu złożonych zagadnień związanych z samoorganizacją, polimorfizmem i wzrostem cienkich warstw w kontekście nauki o materiałach. Badania te miały na celu zgłębienie związków i mechanizmów kierujących procesami samoorganizacji, polimorfizmu krystalicznego oraz wzrostem cienkich warstw w różnych układach materiałowych.

Rozprawa doktorska rozpoczyna się od wprowadzenia w szeroko pojętą dziedzinę nauki o materiałach i podkreślenia jej znaczenia dla rozwoju technologii, rozwiązywania problemów społecznych oraz umożliwiania przełomów w dziedzinach takich jak energetyka, kataliza i elektronika. Następnie, skupiając się na samoorganizacji, polimorfizmie krystalicznym i wzroście cienkich warstw, rozprawa analizuje fundamentalne zależności i mechanizmy kierujące tymi procesami.

W ramach badań nad samoorganizacją, analizowane są procesy tworzenia złożonych struktur samorzutnych, z wykorzystaniem technik symulacji dynamiki molekularnej. Wyniki tych badań dostarczają cennych informacji na temat formowania się struktur samo-organizujących oraz ich potencjalnego zastosowań w materiałach o funkcjonalnościach sterowanych na poziomie molekularnym.

Kolejnym ważnym obszarem badań jest polimorfizm krystaliczny, gdzie szczególną uwagę poświęca się zależnościom między energią konformacyjną a energią sieci krystalicznej a stabilnością i preferencjami konkretnych form krystalicznych. Badania te pozwalają na lepsze zrozumienie mechanizmów kształtujących polimorfizm i umożliwiają zaprojektowanie i syntezę materiałów o pożądanych właściwościach dla różnych zastosowań.

Rozprawa doktorska skupia się również na epitaksji, szczególnie w przypadku cienkich warstw tlenków kobaltu. Badane są zmiany strukturalne zachodzące podczas procesu utleniania alkoholu, co pozwala na lepsze zrozumienie zachowań i potencjału katalitycznego cienkich warstw. Odkrycia te mają istotne znaczenie dla rozwoju modelowych katalizatorów oraz pozwalają na lepsze zrozumienie wzrostu cienkich warstw w warunkach katalitycznych.

Wykorzystanie zaawansowanych technik obliczeniowych, w szczególności metod opartych na teorii funkcjonału gęstości (DFT), umożliwia przewidywanie struktur molekularnych, energii i właściwości materiałów. W rozprawie doktorskiej omawiane są podstawowe zasady i założenia związane z obliczeniami DFT, a także opisywane są korzyści związane z wykorzystaniem tych technik w przewidywaniu struktur, energii i właściwości molekularnych.

Podsumowując, rozprawa doktorska przyczynia się do zgłębienia procesów samoorganizacji, polimorfizmu krystalicznego i wzrostu cienkich warstw, oferując spojrzenie na naukę o materiałach. Przedstawione wyniki badań poszerzają naszą wiedzę w dziedzinie nauki o materiałach i mają istotne implikacje dla projektowania materiałów oraz zastosowań katalitycznych.