

Imię i nazwisko autora rozprawy	Aleksandra Deptuch
Rok urodzenia autora rozprawy	1991
Imię i nazwisko promotora rozprawy	dr hab. Monika Marzec, prof. UJ dr Teresa Jaworska-Gołąb
Wydział	Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Instytut/ Katedra	Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego
Dziedzina wg klasyfikacji KBN	fizyka
Nadawany tytuł	doktor

Tytuł rozprawy w języku polskim	Wpływ struktury molekularnej na właściwości termotropowych chiralnych związków ciekłokrystalicznych badany metodami eksperymentalnymi i obliczeniowymi
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	chiralne fazy smektyczne, dyfrakcja rentgenowska, modelowanie molekularne, kinetyka krystalizacji, przejście szkliste
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	Dziesięć chiralnych estrów z ciekłokrystalicznych szeregów $3FmX_1PhX_2$ ( $m = 2, 4, 5, 6, 7$ ; $X_1, X_2 = H, F$ ) przebadano komplementarnymi metodami eksperymentalnymi i obliczeniowymi pod kątem wpływu struktury molekularnej na przemiany fazowe i właściwości fizyczne. W oparciu o obliczenia kwantowo-mechaniczne dla izolowanych molekuł (metoda DFT i pół-empiryczna metoda AM1) zdefiniowano poprawkę na nieliniowy kształt molekuł, przetestowano jej cztery warianty oraz wykazano, że jej wprowadzenie umożliwia wyznaczenie wartości nasycenia kąta pochylenia tego typu molekuł w oparciu o pomiary dyfrakcyjne. Wyniki przeprowadzonych obliczeń DFT wykorzystano również do analizy widm w podczerwieni dla związku $3F_2HPhF$ . Zbadano polimorfizm faz smektycznych i krystalicznych, a dla wybranych homologów ( $3FmHPhF$ i $3FmFPhF$ , $m = 5$ i $7$ ) przeprowadzono badania kinetyki krystalizacji. Wyznaczono temperaturowe zależności spontanicznej polaryzacji, czasu przełączania, lepkości rotacyjnej, grubości warstw smektycznych, kąta pochylenia molekuł oraz średnią odległość między molekułami i długość korelacji w warstwach smektycznych. Zidentyfikowano procesy relaksacyjne w fazach smektycznych (proces Goldstone'a, proces miękkiej, fazon ferroelektryczny, fazon antyferroelektryczny, proces domenowy, proces alfa). Na podstawie temperaturowej zależności czasu relaksacji procesu alfa określono wartość parametru kruchości dla homologów $3FmHPhF$ ( $m = 5, 6, 7$ ), występujących w zeszkłonej fazie $SmC_A^*$ .

Tytuł rozprawy w języku angielskim	Influence of molecular structure on properties of thermotropic chiral liquid crystals investigated by experimental and computation methods
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	chiral smectic phases, X-ray diffraction, molecular modelling, crystallization kinetics, glass transition
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	<p>An influence of the molecular structure on the phase sequence and physical properties of ten chiral liquid crystalline esters of the <math>3FmX_1PhX_2</math> series (<math>m = 2, 4, 5, 6, 7</math>; <math>X_1, X_2 = H, F</math>) were studied by complementary experimental and computational methods. Based on quantum-mechanical computations (by DFT and semi-empirical AM1 method) a correction for the nonlinear shape of the molecules was proposed, its four different definitions were tested and it was shown that the saturated values of the tilt angle of molecules can be successfully estimated based on X-ray diffraction as long as the shape-related correction is considered. The DFT results were also used to analyze the FT-IR spectra of the 3F2HPhF compound. Polymorphism of liquid crystalline and crystalline phases were investigated, moreover the kinetics of the crystallization process were studied for chosen homologues (3FmHPhF and 3FmFPhF, <math>m = 5, 7</math>). The temperature dependencies of the spontaneous polarisation, the switching time, the rotational viscosity, the smectic layer thickness, the tilt angle as well as the average distances between molecules and the correlation length within smectic layers were determined. Relaxation processes in the smectic phases were identified (as the Goldstone mode, soft mode, ferroelectric phason, antiferroelectric phason, domain mode and alpha mode). For three 3FmHPhF homologues (<math>m = 5, 6, 7</math>), exhibiting the vitrified <math>SmC_A^*</math> phase, the fragility parameter was determined based on the temperature dependence of relaxation time of the alpha mode.</p>