

Imię i nazwisko autora rozprawy	Aleksandra Kubica-Misztal
Rok urodzenia autora rozprawy	1986
Imię i nazwisko promotora rozprawy	Dr hab. Danuta Kruk, prof. UWM
Wydział	Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Instytut/ Katedra	Instytut Fizyki, Zakład Materiałów Organicznych
Dziedzina wg klasyfikacji KBN	biofizyka
Nadawany tytuł	doktor

Tytuł rozprawy w języku polskim	Spektroskopia Elektronowego Rezonansu Spinowego dla kompleksów metali przejściowych w roztworach i deuteronowa spektroskopia Rezonansu Jądrowego - analogie opisu teoretycznego
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	Elektronowy Rezonans Spinowy, rozszczepienie w polu zerowym, kwadrupolowy rezonans jądrowy, wysokospinowe układy paramagnetyczne
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	Rozprawa poświęcona jest analizie teoretycznej kształtu widm Elektronowego Rezonansu Spinowego (ESR) dla układów paramagnetycznych o wysokim spinie, $S \geq 1$, oraz deuteronowej Spektroskopii Rezonansu Jądrowego. Praca koncentruje się na czterech zagadnieniach. Pierwsze z nich dotyczy rozszerzenia modelu kształtu linii ESR w ujęciu perturbacyjnym dla spinu, $S=7/2$, polegającego na uwzględnieniu członów czwartego rzędu w oddziaływaniu ZFS. Drugie zagadnienie to wykorzystanie metod chemii kwantowej do obliczenia parametrów ZFS - osiowej i rombowej składowej tensora ZFS. Porównano wyniki metod wykorzystujących teorię funkcjonałów gęstości oraz opartych na funkcji falowej. Obliczenia wykonano dla układów modelowych oraz kompleksów niklu (II). Trzecie zagadnienie dotyczy rozszerzenia teorii kształtu linii ESR opartej na Stochastycznym Równaniu Liouville (SLE) przy założeniu izotropowej dynamiki rotacyjnej, dla spinu $S=7/2$, polegającym na wprowadzeniu bardziej złożonych mechanizmów fluktuacji oddziaływania ZFS tzw. „free diffusion” (dyfuzja swobodna) i „jump diffusion” (dyfuzja skokowa). Czwarte zagadnienie to adaptacja teorii opartej na SLE do opisu widm Jądrowego Rezonansu Kwadrupolowego (NQR). Ze względu na dużą czułość, metoda NQR jest szeroko stosowana w badaniach dynamiki molekularnej. Prezentowana teoria pozwala na opis widm dla pośredniej skali czasowej, jak również zastosowanie różnych modeli ruchu.

Tytuł rozprawy w języku pracy *	Electron Spin Resonance spectroscopy for transition metal complexes in solution and ^2H Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy - line of theoretical analogies
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	Electron Spin Resonance, Zero Field Splitting, Nuclear Quadrupole Resonance, high spin paramagnetic systems
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	In the thesis theoretical aspects of calculating Electron Spin Resonance (ESR) and Nuclear Quadrupole Resonance (NQR) lineshapes are presented. The thesis addresses four main subjects. The first one is the extension of the ESR lineshape analysis based on the perturbation theory for the electron spin quantum number $S=7/2$. This extended approach involves the 4th order term of the ZFS. In the second part of the thesis quantum chemistry calculations of the Zero Field Splitting (ZFS) are presented. Calculations have been performed using multi-configurational wavefunctions methods and Density Functional Theory for Ni (II) complexes. The third topic concentrates on an extension of Stochastic Liouville Equation approach to ESR lineshape calculations for high spin systems, $S=7/2$, including more advanced mechanisms of the ZFS fluctuations, called jump and free diffusion. The last part of the thesis focuses on implementation of SLE approach to describe NQR lineshape. NQR lineshapes are highly sensitive to the mechanism of motion. Thus, NQR spectroscopy is widely used as a source of information on dynamics of molecular systems. The presented theory allows to describe NQR lineshapes for arbitrary of the molecular dynamics and apply different kinds of motional models.

Tytuł rozprawy w języku angielskim	Electron Spin Resonance spectroscopy for transition metal complexes in solution and ^2H Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy - line of theoretical analogies
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	

* Jeżeli rozprawa jest napisana w języku polskim wystarczy wypełnić pierwszą rubrykę.