

STRESZCZENIE

AUTOR /nazwisko, imię /: Kryński Marcin

TYTUŁ : Density Functional Theory Studies of Structure and Oxygen Diffusivity in δ -Bi₂O₃ Type Compounds

STRONY: 133

PROMOTOR /imię, nazwisko, tytuł nauk./: prof. zw. dr hab. Franciszek Krok oraz dr inż. Wojciech Wróbel

STRESZCZENIE PRACY /14-16 wierszy/

Rodzaj pracy: doktorska
~~habilitacyjna~~

Niniejsza praca poświęcona jest badaniu dwóch stałych przewodników jonów tlenu, Bi₃YO₆ oraz Bi₃NbO₇, przy zastosowaniu metody symulacji *ab initio*. W pierwszej części pracy przedstawiono ogólną charakterystykę przewodników jonowych, ich struktury defektowej oraz zarys teorii przewodnictwa jonowego w tych związkach. Następnie, w drugim rozdziale, omówiono podstawowe właściwości strukturalnie oraz elektryczne tlenku bizmutu oraz badanych związków Bi₃YO₆ i Bi₃NbO₇. Rozdział trzeci przedstawia zarys teoretyczny metody funkcjonału gęstości elektronowej (Density Functional Theory - DFT). Kolejno przedstawiono zagadnienia kluczowe dla zrozumienia tej metody. W rozdziale czwartym opisane są algorytmy stosowane w analizie danych. Rozdziały piąty i szósty rozprawy zawierają analizę wyników symulacji prowadzonych dla badanych związków. Badania struktury elektronowej związków Bi₃YO₆ oraz Bi₃NbO₇ wykazały istnienie w kationie bizmutu charakterystycznego orbitalu. Dla obu związków wyznaczono liczby koordynacyjne poszczególnych jonów, barierę energetyczną na przeskok jonów tlenu w różnych kierunkach, omówiono proces porządkowania się luk tlenowych. Określono zależność średniego przebywania jonów tlenu w położeniach krystalograficznych jak i obsadzenia tych położeń w funkcji ich otoczenia. Na podstawie uzyskanych wyników zapostulowano istnienie dwóch mechanizmów pułapkowania jonów tlenu.