

Krzysztof Hyżorek

Praca doktorska

**Wpływ ograniczeń geometrycznych i polidispersji
rozmiarów cząstek na przewodnictwo cieplne
układów modelowych**

Promotor

dr hab. Konstantin V. Tretiakov, prof. IFM PAN

Zakład Fizyki Komputerowej Układów Złożonych

Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk



Poznań 2018

Streszczenie

W rozprawie przedstawiono wyniki badań nad przewodnictwem cieplnym układów modelowych. Najważniejsze zagadnienia pracy to: przewodnictwo cieplne w nanokanałach wypełnionych ciekłym argonem, przewodnictwo cieplne nanodrutów z argonu oraz przewodnictwo cieplne kryształów Yukawy z polidispersją rozmiarów cząstek.

W części metodologicznej przedstawiono definicję współczynnika przewodnictwa cieplnego, omówiono podstawy metody Dynamiki Molekularnej z uwzględnieniem zastosowanych metod obliczeniowych oraz opisano wykorzystywane modele i potencjały. Oddziaływania pomiędzy atomami argonu opisano potencjałem Lennarda-Jonesa, natomiast oddziaływania cząstek w kryształach koloidalnych opisano potencjałem Yukawy. W tym rozdziale zaproponowano również modyfikację jednej z metod obliczeniowych, która pozwoliła wyznaczyć przewodnictwo cieplne w nanodrutach z argonu. Na końcu tej części rozprawy przedstawiono wszystkie szczegóły symulacji.

W oparciu o przedstawione modele przeprowadzono symulacje komputerowe. W przypadku nanokanałów i nanodrutów zbadano wpływ poprzecznego rozmiaru układu oraz temperatury i gęstości układu na przewodnictwo cieplne. Ponadto, oprócz symulacji komputerowych, dla stałego argonu omówiono modele teoretyczne przewodnictwa cieplnego w układach objętościowych i nanodrutach. Rezultaty obliczeń dla tych modeli porównano z wynikami symulacji komputerowych i dostępnymi wynikami doświadczalnymi, co pozwoliło na wyciągnięcie jakościowych wniosków na temat charakteru rozpraszania fononów w kryształach i nanodrutach z argonu. Przeprowadzone badania pozwoliły również określić, w jaki sposób przewodnictwo cieplne w nanokanałach i nanodrutach z argonu skaluje się z polem powierzchni poprzecznej układu oraz wyznaczyć graniczne rozmiary układów, poniżej których przewodnictwo cieplne odbiega od tego obserwowanego w układach objętościowych.

Badania modelowych kryształów koloidalnych polegały na określeniu wpływu długości ekranowania Debye'a i zróżnicowania wielkości cząstek w układzie na przewodnictwo cieplne kryształu. Symulacje kryształów koloidalnych ujawniły silną zależność współczynnika przewodnictwa cieplnego od polidispersji rozmiarów cząstek. Badania te pokazały również, że wzrost długości ekranowania Debye'a powoduje obniżenie współczynnika przewodnictwa cieplnego.