

Streszczenie w języku polskim

Przedmiotem rozprawy doktorskiej są metody obliczeniowe oparte na zespołach mechaniki statystycznej: mikrokanonicznym i kanonicznym. Zaproponowany i przetestowany został nowy termostat typu Noségo-Hoovera oparty na temperaturze konfiguracyjnej, który wraz z termostatem Allena i Schmida (AS), opartym na temperaturze kinetycznej, tworzą nowy typ termostatu parowego. Zaproponowana została również metoda wykorzystująca formalizm transformaty Laplace'a do wyznaczenia dokładnych formuł na wielkości termodynamiczne układu cząsteczek oddziałujących za pomocą potencjału odwrotnie potęgowego.

Termostaty parowe generują rozkład kanoniczny położeń i pędów, zachowują bezwarunkowo całkowity pęd i moment pędu układu, a równania ruchu są niezmiennicze względem transformacji Galileusza. Termostaty te mogą pełnić ważną rolę w zagadnieniach, w których istotny jest moment pędu układu. Przykłady takich zagadnień obejmują ciała obracające się, w których rotacja ma duży wpływ na ich własności strukturalne, dynamikę drgań i własności termodynamiczne. Procesy powstawania i zlepiania klastrów, powstające mikroturbulencje w cieczach oraz badania dynamiki zderzeń klastrów są obszarami potencjalnego zastosowania termostatów parowych. W rozprawie termostaty parowe porównane zostały z termostatami Noségo-Hoovera i Braga-Travisa, które oparte są na kinetycznej i konfiguracyjnej definicji temperatury. Różnice w działaniu termostatów obserwuje się w nierównowagowej dynamice molekularnej przepływu Couette. Termostaty oparte na temperaturze konfiguracyjnej dają bardzo podobną monotoniczną zależność lepkości ścinania od prędkości ścinania, podczas gdy w układzie termalizowanym równaniami NH obserwuje się nieciągłość lepkości i powstawanie 'fazy łańcuchowej'. Metoda AS powoduje ciągły wzrost lepkości ścinania ze wzrostem prędkości ścinania. W rozprawie zaproponowany również został uogólniony termostat parowy oraz omówione zostały możliwe kierunki dalszych badań nad termostatami parowymi.

Dokładne formuły uzyskane z metody transformaty Laplace'a tworzą podstawę do wyznaczania własności termodynamicznych układu miękkich sfer w całym zakresie miękkości i gęstości, co jest pożądaną sytuacją w przypadku układu referencyjnego. W tym przypadku wielkości termodynamiczne mogą zostać obliczone na podstawie znajomości równania stanu i jego pochodnej po gęstości. W niskich gęstościach zaobserwowano istnienie minimum w ciepłe właściwym przy stałym ciśnieniu, co jest nową obserwacją w układzie cząsteczek z oddziaływaniem wyłącznie odpychającym. Rozważono i przedyskutowano przypadki graniczne: granicę twardych i bardzo miękkich sfer oraz granicę niskogęstościową. Otrzymane wielkości termodynamiczne i strukturalne wskazują na istnienie trzech obszarów miękkości oddziaływania. Ta jakościowa różnica w zależności od miękkości powoduje, że kryteria krzepnięcia oparte na radialnej funkcji rozkładu lub jej pochodnej nie są uniwersalne.