

Paweł Mikołaj Pięłowski

Praca doktorska

**Badanie własności sprężystych
strukturalnie zmodyfikowanych kryształów Yukawy
za pomocą symulacji komputerowych**

Promotor

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

Zakład Fizyki Komputerowej Układów Złożonych

Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk



Poznań 2017

Streszczenie

W rozprawie doktorskiej zbadano wpływ polidispersji rozmiarów cząstek oraz modyfikacji struktury na własności sprężyste modeli kryształów, w których cząstki oddziałują potencjałem Yukawy. Zaproponowano nowe podejście do poszukiwania mechanizmów prowadzących do własności auksetycznych, jakim jest modyfikacja struktury na poziomie atomowo-molekularnym. Przedmiotem badań były dwuwymiarowe i trójwymiarowe polidispersyjne kryształy Yukawy oraz kryształy Yukawy z nanowastwami i nanokanałami. Badania przeprowadzono przy pomocy symulacji Monte Carlo w zespole izobaryczno-izotermicznym, a własności sprężyste wyznaczono metodą Parrinello-Rahmana.

W pracy dokonano analizy wpływu polidispersji rozmiarów cząstek na własności auksetyczne kryształów Yukawy, za pomocą zaproponowanego parametru – stopnia auksetyczności. Badania kryształów Yukawy zmodyfikowanych strukturalnie ukazały szereg możliwości, pozwalających na kontrolę własności sprężystych tych układów. Przeprowadzone badania pokazały, że modyfikacje struktury kryształów Yukawy w postaci nanowarstw i nanokanałów pozwalają nie tylko na wzmocnienie własności auksetycznych w pewnych kierunkach krystalograficznych, ale również na ich osłabienie, bądź wręcz „usunięcie”, w całej płaszczyźnie krystalograficznej.