

## Autoreferat

1. Imię i nazwisko.

Jakub W. Narojczyk

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe lub artystyczne – z podaniem podmiotu nadającego stopień, roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej.

- Dyplom uzyskania tytułu zawodowego magistra inżyniera wydany 7 lipca 2004 roku przez Politechnikę Poznańską po ukończeniu studiów wyższych na kierunku Fizyka Techniczna o specjalności symulacje komputerowe. Tytuł pracy magisterskiej: *Symulacje komputerowe stałych sprężystości wybranych modeli faz krystalicznych*, której promotorem był prof. dr hab. Krzysztof W. Wojciechowski (IFM PAN).
- Dyplom uzyskania stopnia naukowego **doktora nauk fizycznych**; fizyka ciała stałego, nadany uchwałą Rady Naukowej Instytutu Fizyki Molekularnej PAN z dnia 16 czerwca 2009. Tytuł rozprawy doktorskiej: *Symulacje komputerowe wpływu dyspersji rozmiarów cząsteczek na współczynnik Poissona w układach modelowych*, której promotorem był prof. dr hab. Krzysztof W. Wojciechowski (IFM PAN).
- Dyplom ukończenia studiów podyplomowych *Metody Informatyczne w Mechatronice* na wydziale Elektrycznym Politechniki Poznańskiej (2010).
- Dyplom ukończenia studiów podyplomowych *Menedżer Projektu Badawczo-Rozwojowego* na Wyższej Szkole Bankowej w Poznaniu (2011).
- Dyplom ukończenia studiów podyplomowych *Agrotronika* na wydziale Inżynierii Środowiska i Inżynierii Mechanicznej Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu (2023).

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych lub artystycznych.

### Zatrudnienie w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN

- 01.10.2008 – 30.06.2009 w wymiarze 1/4 etatu, stanowisko: fizyk,
- 01.01.2010 – 31.12.2011 w wymiarze pełnego etatu, stanowisko: fizyk,
- 01.01.2012 – (obecnie) w wymiarze pełnego etatu, stanowisko: adiunkt.

### Zatrudnienie w Państwowej Wyższej Szkole Zawodowej im. Prezydenta S. Wojciechowskiego w Kaliszu

- 01.10.2009 – 28.02.2015 w wymiarze 1/2 etatu, stanowisko: wykładowca.

4. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 z późn. zm.). Omówienie to winno dotyczyć merytorycznego ujęcia przedmiotowych osiągnięć, jak i w sposób precyzyjny określać indywidualny wkład w ich powstanie, w przypadku, gdy dane osiągnięcie jest dziełem współautorskim, z uwzględnieniem możliwości wskazywania dorobku z okresu całej kariery zawodowej.

Własności sprężyste materiałów są jednymi z najwcześniej badanych przez człowieka wielkości fizycznych. Dysponujemy obecnie wyznaczonymi z dużą dokładnością wartościami takich wielkości materiałowych jak, między innymi, moduły sprężystości ( $C$ ), moduł Younga ( $Y$ ), moduł odkształcalności objętościowej ( $B$ ), moduł odkształcalności postaciowej ( $\mu$ ) czy współczynnik Poissona ( $\nu$ ). Jednakże związki pomiędzy tymi makroskopowymi własnościami sprężystymi a mikroskopową strukturą materiałów oraz zjawiskami zachodzącymi na poziomie tejże struktury, nie są do końca zbadane i zrozumiane. Jaskrawym tego przykładem jest fakt, że niepełna 40 lat temu w podręcznikach traktujących o sprężystości materii można było znaleźć zapisy, że materiały charakteryzujące się ujemną wartością współczynnika Poissona (NPR) nie są znane. Zostały one zaproponowane i wytworzone dopiero w drugiej połowie lat osiemdziesiątych ubiegłego wieku. Dziś, kiedy wyzwania stawiane przed inżynierami praktycznie wszystkich dziedzin, wymagają tworzenia nowych materiałów, często o bardzo specyficznych właściwościach, niezbędne jest dogłębne zrozumienie wpływu mechanizmów zachodzących na poziomie struktury atomowej czy molekularnej, oraz ich wpływu na makroskopowe własności materiałów. Spodziewamy się, że wiedza ta pozwoli na modyfikowanie właściwości makroskopowych materiałów (między innymi własności sprężystych), na tworzenie nowych materiałów o ulepszonych właściwościach, a także materiałów o właściwościach dostosowanych do potrzeb konkretnych zastosowań.

Zrozumienie wpływu zjawisk zachodzących na poziomie mikroskopowym na własności makropowe materii jest zagadnieniem ogólnym, wymagającym systematycznych badań podstawowych. Jedną z dróg do pozyskania tej wiedzy jest zbadanie własności sprężystych uproszczonych modeli oraz pokazanie jak zmieniają się one w wyniku modyfikacji wprowadzanych na poziomie struktury tych modeli. Układ twardych kul (HSS) jest jednym z fundamentalnych modeli fizycznych, który jest szeroko stosowany w mechanice statystycznej płynów i ciał stałych. W modelu tym oddziaływania międzycząsteczkowe mają charakter czysto geometryczny. Można opisać je za pomocą tzw. twardego potencjału, który jest równy zeru, gdy odległość pomiędzy środkami dowolnych dwóch kul jest nie mniejsza od sumy ich promieni (mówimy wtedy, że cząstki nie przekrywają się) i nieskończony, jeśli tak nie jest (wtedy mówimy, że cząstki przekrywają się). Układ twardych kul stanowi model referencyjny w teorii cieczy[1, 2]. Jest to jednocześnie najprostszy model wykazujący przejście fazowe pomiędzy cieczą a kryształem[1, 3]. Odpowiedź na pytanie jaka jest struktura termodynamicznie stabilnej fazy krystalicznej twardych kul wiąże się z wysuniętą przez Johanna Keplera w roku 1611 hipotezą, że nie ma gęstszego upakowania twardych kul niż to, jakie można uzyskać układając na siebie warstwy, w których kule tworzą upakowanie heksagonalne[4]. Innymi słowy, Kepler przypuszczał, że nie można upakować twardych kul gęściej, niż ma to miejsce w przypadku gęsto upakowanej powierzchniowo centrowanej struktury kubicznej (f.c.c.). Hipoteza ta została udowodniona przez S. P. Ferguson'a i T. C. Hales'a pod koniec XX wieku i opublikowana na początku obecnego stulecia[5]. Ponieważ heksagonalne warstwy wspomniane przez Keplera można układać nie tylko w taki sposób, jak to ma miejsce w strukturach f.c.c. i gęsto upakowanej strukturze heksagonalnej (h.c.p.) ale także na wiele innych sposobów (których liczba jest nieskończona w granicy termodynamicznej), powstało pytanie, która z tych struktur (będących równie gęstymi w granicy gęstego upakowania) jest termodynamicznie stabilna? Symulacje numeryczne wykazały, że struktura f.c.c. ma niższą energię swobodną niż struktu-

ra h.c.p. w całym zakresie stabilności fazy krystalicznej[6–9]. Dalsze symulacje wskazały, że energia swobodna struktury f.c.c. jest także niższa od energii swobodnych innych możliwych struktur gęsto upakowanych twardych kul[10]. Prowadzi to do wniosku, że termodynamicznie stabilna faza krystaliczna twardych kul ma symetrię kubiczną i strukturę f.c.c.!

Symulacje komputerowe umożliwiły nie tylko wyznaczenie równania stanu[11], ale i właściwości sprężystych układu twardych kul[12–15]. Wyznaczonych stałych sprężystości można było użyć do obliczenia współczynnika Poissona (PR), który jest ujemnym stosunkiem względnej zmiany rozmiaru poprzecznego do względnej zmiany rozmiaru podłużnego przy zmianie naprężenia podłużnego. Okazało się, że PR, który dla układów anizotropowych zwykle zależy zarówno od kierunku zmiany przyłożonego naprężenia, jak i od prostopadłego do niego kierunku pomiaru odkształcenia[16], jest ujemny, gdy zmiana naprężenia zachodzi w kierunku  $[110]$ , a odkształcenie mierzone jest w kierunku  $[1\bar{1}0]$  [12, 17]. W tym miejscu warto zauważyć, że ujemność PR we wspomnianych kierunkach jest spotykana w układach o strukturze f.c.c.[18] oraz większości metali o symetrii kubicznej[19].

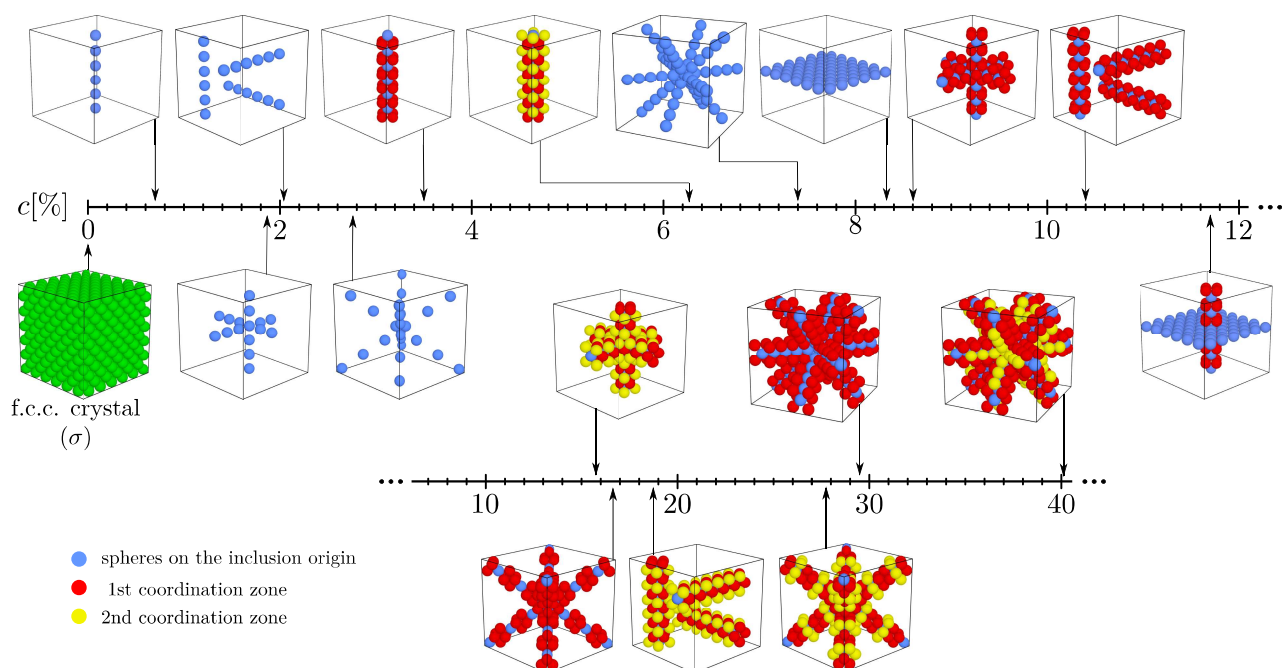
Ujemny współczynnik Poissona uważany jest za anomalny, bo oznacza rozszerzanie się ciała poprzecznie do kierunku rozciągania, co jest sprzeczne z bazującą na obserwacjach z życia codziennego intuicją, np. rozciągana guma kurczy się w kierunkach poprzecznych. Materiały wykazujące ujemny współczynnik Poissona, określane niekiedy jako *dilational materials*[20], zwykle określane są mianem *auksetyków*[21]. Pierwsze mechaniczne modele wykazujące NPR znane są od około 40 lat[22–24]. Pierwsze doniesienia o termodynamicznie stabilnej i izotropowej fazie wykazującej ten efekt są datowane na 1987 rok i dotyczą dwuwymiarowego modelu twardych heksamerów cyklicznych[25, 26]. Rygorystyczne analityczne rozwiązanie tego modelu, w granicy zerowej temperatury, zostało podane w pracy[27]. Pierwszy rzeczywisty materiał wykazujący ujemny współczynnik Poissona, będący pianą poliuretanową poddaną specjalnej obróbce termicznej pod zwiększonym ciśnieniem, został stworzony w 1987 roku przez Lakes’a[28]. Od tego czasu auksetyki są intensywnie badane, nie tylko eksperymentalnie (np. [29–31]), ale również metodami teoretycznymi (np. [20, 24, 32–34]), oraz z wykorzystaniem symulacji komputerowych (np. [15, 35–39]).

Pomimo wieloletnich badań, mechanizmów auksetyczności na poziomie mikroskopowym są one wciąż raczej słabo zbadane i daleko nam do pełnego ich zrozumienia. Symulacje komputerowe stanowią wydajne narzędzie do przeprowadzenia systematycznych badań wybranych modeli mikroskopowych, które przyczyniają się do poszerzenia naszej wiedzy na temat natury własności auksetycznych.

Dlatego rozsądnie jest zacząć badania od najprostszych modeli i następnie zwiększać ich stopień złożoności. Ponieważ kryształy kubiczne wykazują najwyższą symetrię spośród wszystkich periodycznych struktur krystalicznych, a opis ich właściwości sprężystych wymaga znajomości tylko trzech niezależnych wielkości[40], jest rzeczą naturalną rozpocząć badania od mikroskopowych modeli tej klasy układów. Układ twardych kul jest najprostszym modelem ciała stałego o strukturze kubicznej powierzchniowo-centrowanej. W badaniach opisywanych poniżej zbadano wpływ modyfikacji, wprowadzonych do struktury krystalicznej f.c.c., na makroskopowe własności sprężyste prostych modeli twardych cząstek.

W badaniach opisanych modeli zastosowano symulacje komputerowe z wykorzystaniem metody Monte Carlo w zespole izotermiczno-izobarycznym ze zmiennym kształtem pudła periodycznego. Własności sprężyste badanych układów wyznaczono korzystając z podejścia Parrinello–Rahman’a[41, 42]. Ta dobrze ugruntowana i udoskonalona w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN[43] metoda pozwala na wyznaczanie wprost z fluktuacji kształtu układu tensora podatności sprężystych  $S_{\alpha\beta\gamma\delta}$ . Znajomość wszystkich składowych tensora pozwala na pełny opis własności sprężystych kryształu o dowolnej symetrii.

Modyfikacje struktury mogą być dokonane na wiele sposobów. W przedstawionych poniżej badaniach modyfikacje te polegały na zastąpieniu niektórych cząstek, cząstkami o innym

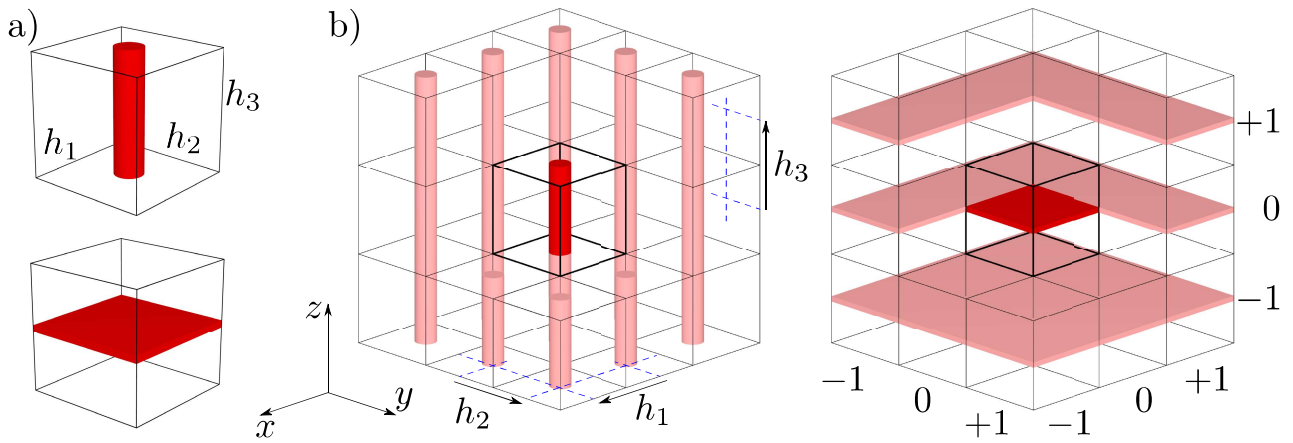


Rysunek 1: Wybrane modele zawierające inkluzje, uszeregowane względem rozmiaru inkluzji (stosunku ilości kul tworzących inkluzję do liczby wszystkich kul w układzie). Zielone cząstki, o średnicy  $\sigma$  zostały usunięte z pozostałych grafik jedynie, aby pokazać strukturę inkluzji. Wszystkie cząstki w pozostałych kolorach są jednakowe i mają średnicę  $\sigma'$ . Różne kolory zostały użyte, aby pokazać jak daleko dane cząstki znajdują się od osi symetrii nanokanału lub od wybranej płaszczyzny inkluzji.

rozmiarze. Takie zmiany, polegające na wprowadzaniu cząstek o średnicach równych  $\sigma'$  do kryształu f.c.c. twardych kul o średnicy  $\sigma$  można utożsamiać z wprowadzaniem do układu “inkluzji”, a kształt tych ostatnich może być dowolny. Inkluzje wykorzystane w poniższych badaniach miały symetrię cylindryczną lub stanowiły wybraną płaszczyznę krystaliczną. Wizualizacje wybranych modeli z inkluzjami zostały przedstawione na rys. 1. Ze względu na to, że modele rozważane były w okresowych warunkach brzegowych, mamy zatem do czynienia z inkluzjami rozciągającymi się w nieskończoność odpowiednio w jednym wymiarze (nanokanały) lub dwóch wymiarach (nanowarstwy). Efektywnie powstaje zatem układ z okresowo rozmieszczoną siecią inkluzji - kryształ zawierający sieć nanokanałów lub stos równoległych nanowarstw. Zostało to schematycznie przedstawione na rys. 2, gdzie przykładowe modele zawierające inkluzje w postaci nanokanału lub nanowarstwy (rys.2a) zostały zilustrowane w otoczeniu swoich okresowych obrazów (rys. 2b).

Najprostszym przypadkiem takich inkluzji jest wprowadzenie do superkomórki inkluzji w postaci nanokanału wypełnionego twardymi kulami innego rozmiaru (zorientowanego w kierunku [001] - tzw. kierunku wysokiej symetrii, dla którego współczynnik Poissona nie zależy od wyboru kierunku w płaszczyźnie doń ortogonalnej). Wielkość wprowadzonego nanokanału (ilość cząstek stanowiących inkluzję w stosunku do wszystkich cząstek w układzie) może być również dowolnie określona. W pracy[H2] zastosowano nanokanał składający się z cząstek leżących dokładnie na wybranej osi krystalicznej oraz ich najbliższych sąsiadów (jedną strefę koordynacyjną). Dla wybranego ciśnienia pokazano, że w wyniku takiej zmiany, w każdym przypadku gdy  $\sigma' \neq \sigma$  układ traci symetrię kubiczną. Pokazano, że zwiększanie wartości  $\sigma' > \sigma$  prowadzi do symetrii tetragonalnej (klasa symetrii 422[44], opisana sześcioma niezależnymi współczynnikami podatności sprężystej). Jednocześnie powoduje to zanik własności auksetycznych (wzrost współczynnika Poissona z wartości ujemnych do wartości dodatnich)





Rysunek 2: Przykładowe modele z inkluzjami w postaci nanokanału i nanowarstwy (a), przedstawione w periodycznych warunkach brzegowych (b). Niektóre periodyczne obrazy obu układów zostały celowo usunięte z rysunku w celu poprawy czytelności.

w kierunku  $[110][\bar{1}\bar{1}0]$ . Warto zauważyć, że jest to kierunek, w którym kryształ twardych kul o symetrii f.c.c. wykazuje własności auksetyczne. Jednakże zaobserwowano obniżenie się współczynnika Poissona w kierunku  $[111][11\bar{2}]$  z wartości 0.065 do wartości  $-0.365$ , co pokazuje, że zastosowana inkluzja pozwoliła na pojawienie się nowych kierunków, w których występują własności auksetyczne. Najniższa wartość współczynnika Poissona dla tego modelu wynosiła  $-0.87$  w przypadku gdy  $\sigma'/\sigma = 1.09$ , co stanowi znaczne wzmocnienie własności auksetycznych układu w porównaniu z kryształem f.c.c. jednorodnych kul, dla którego najmniejszy współczynnik Poissona (w kierunku  $[110][\bar{1}\bar{1}0]$ ) wynosi  $\nu \sim -0.06$ . Istotnym czynnikiem wpływającym na własności sprężyste układu zawierającego inkluzję jest jej rozmiar. W pracy[H7] dopełniono poprzednie badania poprzez symulacje układów zawierających periodyczne sieci nanokanałów, zorientowane w kierunku  $[001]$ , o czternastu różnych średnicach. Najwęższy nanokanał zawierał jedynie 0.69% cząstek układu, a największy aż 56.25%. Pokazano[H7], że nie tylko rozmiar, ale również kształt zastosowanej inkluzji ma istotny wpływ na własności sprężyste układu.

Drugim prostym układem zawierającym inkluzje jest (badany w pracy[H3]) układ, którego superkomórka zawiera jedną warstwę cząstek o średnicy  $\sigma'$ . Warstwa ta jest zorientowana ortogonalnie do kierunku  $[001]$ . Otrzymujemy zatem układ z periodycznie rozmieszczonym stosem nanowarstw (001). Wraz ze wzrostem wartości  $\sigma'/\sigma$ , symetria układu zmienia się z kubicznej do tetragonalnej (co jest odzwierciedlone w postaci macierzy współczynników podatności sprężystej  $\mathbf{S}$ ). Obserwujemy wzrost wartości (ujemnego) współczynnika Poissona w kierunku  $[110][\bar{1}\bar{1}0]$  do zera. W odróżnieniu od układu z kanałem kierunek  $[111][11\bar{2}]$  nie staje się auksetyczny, jednakże obserwujemy obniżenie się wartości (ujemnego) współczynnika Poissona w kierunku  $[101][\bar{1}01]$  z wartości  $\nu = -0.059$  do wartości  $\nu = -0.11$  (przy ciśnieniu bezwymiarowym  $p^* = 100$ ). Obserwujemy zatem wzrost auksetyczności badanego modelu w porównaniu z kryształem monoatomowym o symetrii f.c.c., jednakże jest on znacznie mniejszy niż obserwowany w układzie zawierającym nanokanał.

Ponieważ inkluzje w badanych modelach można kształtować w sposób dowolny, logiczną konsekwencją przeprowadzonych badań było postawienie pytania jak zmieniają się własności sprężyste układu twardych kul, gdy w jednym modelu połączymy oba rodzaje inkluzji. Wyniki opublikowane w pracy[H4] pokazały, że pomimo iż otrzymujemy układ o symetrii analogicznej do poprzednich dwóch przypadków, to jej wpływ na własności sprężyste modelu jest całkowicie przeciwny. Badania, przeprowadzone w trzech różnych warunkach termodynamicznych (różnych wartości zewnętrznego, hydrostatycznego, ciśnienia) pokazały, że połączenie nanoka-

nału zorientowanego w kierunku [001] oraz ortogonalnie do niego umieszczonej nanowarstwy całkowicie eliminuje własności auksetyczne w rozważanym modelu. Można zauważyć, że wraz ze wzrostem wartości  $\sigma'/\sigma$  minimalne współczynniki Poissona, zmierzone w którymkolwiek z kierunków, rosną i nie znajdujemy w układzie żadnego kierunku, dla którego współczynnik Poissona jest ujemny. Pokazano zatem, że za pomocą inkluzji wprowadzonej do struktury krystalicznej, możliwe jest nie tylko wzmacnianie auksetyczności, ale również eliminacja własności auksetycznych z układu.

W opisanych powyżej pracach wprowadzenie inkluzji wiązało się ze zmianą symetrii układu z kubicznej do tetragonalnej (klasa symetrii 422). Postawiono zatem pytanie: czy uda się zaprojektować takie inkluzje, które nie spowodują zmiany symetrii układu oraz jaki wpływ będą miały na własności sprężyste modelu? W pracach[H5,H6] rozważono układ, którego superkomórka składająca się z  $N$  cząstek, zawierała jednocześnie trzy nanokanały. Były one zwrócone odpowiednio w kierunkach [100], [010] i [001] (ortogonalnie do siebie). Zbadano trzy najmniejsze rozmiary nanokanałów: zawierające jedynie cząstki leżące na osi inkluzji[H6] oraz obejmujące ich pierwszą i drugą strefę koordynacyjną[H5]. Zaproponowane inkluzje mogą być rozłożone w przestrzeni na wiele sposobów. Zbadano dwa graniczne przypadki, w których osi symetrii nanokanałów przecinają się ze sobą, lub są od siebie oddalone o pewną liczbę stałych sieci, większą niż wynoszą ich średnice (bark przekrywania się kanałów). Badania pokazały, że taki układ inkluzji z punktu widzenia właściwości sprężystych zachowuje się tak, jak gdyby miał symetrię kubiczną, co jest odzwierciedlone w wartościach współczynników podatności sprężystych, które zachowują (w granicy dokładności obliczeniowej) równości wymagane przez symetrię kubiczną, mianowicie:  $S_{11} = S_{22} = S_{33}$ ,  $S_{44} = S_{55} = S_{66}$  oraz  $S_{12} = S_{13} = S_{23}$  a pozostałe elementy macierzy pozostają zerami. Układy te zbadano dla czterech różnych warunków termodynamicznych. Wyniki pokazały, że podobnie jak w przypadku modelu rozważanego w pracy[H4], wprowadzenie trzech rozseparowanych nanokanałów również prowadzi do eliminacji własności auksetycznych w badanym układzie. Otrzymaliśmy zatem układ o symetrii “kubicznej” bez jednej z jego immanentnych cech, jaką jest częściowa auksetyczność. Natomiast w przypadku inkluzji przecinających się, auksetyczność została wprowadzić bardzo silnie zmniejszona, ale nie zanikła. Pokazano również, że wprowadzenie tych inkluzji zazwyczaj prowadzi do wzrostu anizotropii własności sprężystych kryształu, jednakże w przypadku jednego modelu (z rozseparowanymi nanokanałami o średnicy obejmującej pierwszą strefę koordynacyjną cząstek wokół osi symetrii inkluzji) powoduje silny spadek anizotropii własności sprężystych. Dla układu izotropowego zachodzi równość:  $B_{11} - B_{12} = 2B_{44}$ , gdzie  $B_{ij}$  są elementami macierzy stałych sprężystości będącą odwrotnością macierzy podatności sprężystych  $\mathbf{S}$ , a wyrażenie będące ilorzem lewej i prawej strony tej równości można traktować jak współczynnik anizotropii sprężystej.

Kolejnym modelem z inkluzjami zachowującymi symetrię kryształu f.c.c. był układ, którego superkomórka zawierała cztery nanokanały zorientowane wzdłuż czterech przekątnych sześciangu (kierunek [111] i jego odpowiedniki)[H8]. Pokazano, że anizotropia własności sprężystych układu silnie rośnie a własności auksetyczne zanikają ze wzrostem wartości  $\sigma'/\sigma$  (podobnie jak w pracach[H5,H6]). Ponadto w przypadku inkluzji złożonych z szerokich nanokanałów (o średnicach obejmujących dwie strefy koordynacyjne wokół ich osi symetrii) efekt ten jest widoczny również w przypadku, gdy wartość  $\sigma'/\sigma$  jest mniejsza od 1. W układach, w których inkluzje obejmowały mniejszy odsetek cząstek układu, taki efekt nie był obserwowany. Obecny model, w którym największa z badanych inkluzji obejmowała ponad 27% cząstek w układzie, pokazuje, że również koncentracja cząstek inkluzji (rozumiana jako stosunek liczby cząstek tworzących inkluzję do całkowitej liczby cząstek) ma istotny wpływ na zmianę własności sprężystych badanych modeli.

Ostatnim rozważanym do tej pory modelem zawierającym inkluzje i zachowującym symetrię kubiczną, był model zawierający sześć nanokanałów zorientowanych w płaszczyznach

sześcianu, w kierunkach [110] - i jego symetrycznych odpowiednikach[H9]. Badania przeprowadzono dla trzech różnych rozmiarów inkluzji oraz w czterech różnych warunkach termodynamicznych. Wyznaczone własności sprężyste tego modelu porównano z modelem zawierającym cztery nanokanały[H8]. Pokazano, że w przeciwieństwie do poprzedniego modelu, własności auksetyczne maleją, ale nie zanikają. Takie właśnie zachowanie możemy obserwować w układzie zawierającym cztery nanokanały. Jednakże badania przeprowadzone w tej pracy pokazały, że twardość i sztywność modelu z sześcioma kanałami nie tylko nie spada w porównaniu z czystym kryształem twardych kul, ale dodatkowo silnie rośnie wraz ze wzrostem rozmiarów cząstek tworzących inkluzję ( $\sigma'/\sigma$ ). Jest to zupełnie nowy wynik, który nie był obserwowany w poprzednio badanych modelach.

Interesującym jest również fakt, jak na własności sprężyste twardych układów z inkluzjami wpływa pojawienie się dodatkowych więzów pomiędzy cząstkami. Aby to sprawdzić, zbadano dwa przypadki: kryształ złożony z prostych dwuatomowych molekuł (twardych dimerów), do którego wprowadzono inkluzję w postaci nanokanału wypełnionego twardymi kulami[H1], oraz kryształ twardych kul z analogiczną inkluzją wypełnioną dimerami[H10]. W pierwszym przypadku molekuły tworzące kryształ charakteryzowały się brakiem periodycznego uporządkowania translacyjnego molekuł, jednak atomy tych molekuł (w gęstym upakowaniu, gdy  $\sigma = 1$ ) tworzyły idealną sieć f.c.c.. Mamy tu zatem do czynienia z tzw. fazą zdegenerowanego kryształu (DC)[45]. W efekcie wprowadzenia do takiego układu inkluzji w postaci nanokanału wypełnionego kulami i zorientowanego w kierunku [001], otrzymujemy pewnego rodzaju dwuskładnikowy kompozyt. Pokazano, że gdy wartość  $\sigma'/\sigma$  rośnie, ujemny współczynnik Poissona w kierunku [110] zanika, ale równocześnie kierunek [111] staje się kierunkiem, w którym obserwujemy pojawienie się własności auksetycznych (nieco większych niż w przypadku czystego układu DC. Ponadto pokazano, że kompozyt powstały w wyniku zastosowania inkluzji może wykazywać właściwości sprężyste wykraczające poza zakres właściwości dostępnych dla układów monoskładnikowych zbudowanych osobno z kul lub dimerów.

Własności sprężyste modelu twardych kul z kanałem w kierunku [001], wypełnionego dimerami[H10] porównano z analogicznym modelem złożonym jedynie z twardych kul[H2]. Zbadano dwa przypadki: (i) w którym środki kul tworzących molekułę dimeru znajdowały się zawsze w odległości  $\sigma$  od siebie (niezależnie od aktualnej wartości  $\sigma'$ ), oraz (ii) w którym środki tych kul znajdowały się od siebie w odległości  $\sigma'$ . W każdym z tych przypadków rozważono dwa rozmiary nanokanałów o średnicach zawierających odpowiednio jedną lub dwie strefy koordynacyjne cząstek. Badania pokazały, że obecność molekuł wewnątrz inkluzji pozostaje bez wpływu na współczynnik Poissona, jednakże można zauważyć, że obecność (relatywnie niewielkiej liczby) molekuł nieznacznie wpływa na wzrost twardości i sztywności układu.

**Podsumowując**, najważniejszymi osiągnięciami naukowym dotyczącymi wpływu nanoinkluzji na własności sprężyste wybranych układów modelowych twardych cząstek są:

- Pokazanie, że modyfikacje struktury krystalicznej poprzez wprowadzenie inkluzji do układu twardych kul prowadzą do istotnych zmian jego własności sprężystych, a w szczególności jego własności auksetycznych[H1-H10]. W zależności od rodzaju inkluzji możemy wzmocnić[H2,H3], osłabić[H7,H9] lub wyeliminować własności auksetyczne układu twardych kul[H4-H6,H8].
  - Wprowadzenie inkluzji w postaci nanokanału w kierunku krystalograficznym [001], wypełnionych kulami o innej średnicy powoduje wzmocnienie własności auksetycznych, a nawet prowadzi do pojawienia się nowych kierunków krystalograficznych z ujemną wartością współczynnika Poissona[H1,H2].

- Wprowadzenie inkluzji w postaci nanowarstwy (001) wypełnionej kulami o innej średnicy powoduje wzrost własności auksetycznych[H3], jednakże nie tak silny jak w przypadku nanokanałów [001].
- Połączenie inkluzji w formie nanokanału w kierunku krystalograficznym [001] i nanowarstwy (001) wypełnionych kulami o innej średnicy eliminuje własności auksetyczne z układu[H4].
- Możliwość uzyskania układu twardych kul z inkluzjami o symetrii kubicznej[H5-H6, H8, H9], z których niektóre zachowują własności auksetyczne[H5,H6,H9] lub charakteryzują się znacznie większą twardością i sztywnością niż monoatomowy kryształ twardych kul[H9].
  - niezwykle ciekawą obserwacją jest wzrost twardości i sztywności kryształu twardych kul poprzez wprowadzenie sześciu kanałów, w kierunkach [110] i równoważnych, wypełnionych twardymi kulami innego rozmiaru[H9], ponieważ zazwyczaj wprowadzenie takich kanałów w innych kierunkach krystalograficznych prowadzi do zmniejszenia sztywności układu twardych kul[H8].
  - Nieznaczny wzrost twardości układu zawierającego inkluzje można również uzyskać wprowadzając dodatkowe więzy w postaci wiązań molekularnych pomiędzy atomami tworzącymi inkluzje[H10].
- Wskazanie, iż pomimo że inkluzje powodują zwykle silny wzrost anizotropii własności sprężystych kryształu twardych kul[H5,H6,H8], to wykorzystując trzy nanokanałowe inkluzje w kierunkach [100], [010] i [001], ułożone tak aby nie przekrywały się, zawierające tylko pierwszą strefę koordynacyjną cząstek, można wywołać znaczące zmniejszenie anizotropii własności sprężystych kryształu twardych kul[H5].
- Na podstawie przeprowadzonych badań można stwierdzić, że kształt, orientacja i rozmieszczenie w przestrzeni zastosowanych inkluzji mają również istotny wpływ na własności sprężyste modelu[H5-H7].

**Lista powiązanych tematycznie artykułów naukowych** stanowiących podstawę osiągnięć omówionych powyżej:

- H1 J. W. Narojczyk, M. Kowalik, K. W. Wojciechowski, *Influence of nanochannels on Poisson's ratio of degenerate crystal of hard dimers*, Phys. Status Solidi B 253(7), 1324-1330, 2016.
- H2 J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretyakov, J. Smardzewski, F. Scarpa, P. M. Piękowski, M. Kowalik, A. R. Imre, M. Bilski, *Auxetic properties of a f.c.c. crystal of hard spheres with an array of [001]-nanochannels filled by hard spheres of another diameter*, Phys. Status Solidi B 256, 1800611, 2019.
- H3 J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, *Poisson's ratio of the f.c.c. hard sphere crystals with periodically stacked (001)-nanolayers of hard spheres of another diameter*, Materials 12, 700, 2019.
- H4 J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, J. Smardzewski, A. R. Imre, J. N. Grima, M. Bilski, *Cancellation of auxetic properties in f.c.c. hard sphere crystals by hybrid layer-channel nanoinclusions filled by hard spheres of another diameter*, Materials 14, 3008, 2021.

- H5 J. W. Narojczyk, M. Bilski, J. N. Grima, P. Kędziora, D. Morozow, M. Rucki, K. W. Wojciechowski, *Removing auxetic properties in f.c.c. hard sphere crystals by orthogonal nanochannels with hard spheres of another diameter*, Materials 15, 1134, 2022.
- H6 J. W. Narojczyk, K. V. Tretyakov, K. W. Wojciechowski, *Rise of the Poisson's ratio in f.c.c. hard sphere crystals with the narrowest orthogonal nanochannels filled by hard spheres of another diameter*, Computational Methods in Science and Technology 28(2), 61–75, 2022.
- H7 J. W. Narojczyk, K. V. Tretyakov, K. W. Wojciechowski, *Partially auxetic properties of face-centered cubic hard-sphere crystals with nanochannels of different sizes, parallel to [001]-direction and filled by other hard spheres*, Phys. Status Solidi B 259(6), 2200006, 2022.
- H8 J. W. Narojczyk, K. V. Tretyakov, K. W. Wojciechowski, *Poisson's ratio of f.c.c. hard-sphere crystals with cubic supercells containing four nanochannels filled by hard spheres of another diameter*, Phys. Status Solidi B 259(12), 2200464, 2022.
- H9 J. W. Narojczyk, K. V. Tretyakov, J. Smardzewski, K. W. Wojciechowski, *Hardening of fcc hard sphere crystals by introducing nanochannels – auxetic aspects*, Phys. Rev. E (EG12682 - accepted for publication), 2023.
- H10 J. W. Narojczyk, *The f.c.c. crystals of hard spheres with an array of [001]-nanochannel inclusions filled by the simplest hard sphere molecules*, Computational Methods in Science and Technology (accepted for publication) DOI: 10.12921/cmst.2023.0000023, 2023.

**Dodatkowym osiągnięciem,** które habilitant uważa za ważne, było zbadanie własności sprężystych szeregu dwuwymiarowych modeli[46–48] charakteryzujących się pewnym stopniem nieuporządkowania wynikającego z polidispersji rozmiarów cząstek. W zbadanych układach cząstki oddziaływały miękkim, czysto odpychającym potencjałem odwrotnie potęgowym. Zbadano modele atomowe oraz molekularne, stworzone z cząstek dwu- i trójatomowych. Nieporządek struktury krystalicznej był wynikiem losowej wartości średnic atomów, których rozkład prawdopodobieństwa odpowiadał rozkładowi normalnemu o pewnej zadanej wartości odchylenia standardowego. Własności sprężyste tych modeli zostały wyznaczone w ujęciu statycznym, tzn. w warunkach gdy temperatura układu jest równa 0K.

Pokazano, iż jakikolwiek nieporządek w postaci dowolnej, niezerowej polidispersji rozmiarów cząstek prowadzi, w ogólności, do wzrostu współczynnika Poissona do maksymalnej dozwolonej wartości w granicy twardych oddziaływań. W przypadku dwuwymiarowych układów izotropowych jest to wartość  $+1$ [46]. Pokazano również, że szorstkie i asymetryczne kształty molekuł prowadzą do obniżenia współczynnika Poissona, oraz że istnieją (nawet w obecności polidispersji) układy miękkich cząstek, które są częściowymi auksetykami[47]. Pokazano explicite, iż współczynnik Poissona układów anizotropowych może być znacząco niższy niż układów izotropowych (dla których ujemnym ekstremum jest  $\nu = -1$ ). Pokazano, że rozkład rozmiarów cząstek wpływa na własności sprężyste głównie poprzez swoje dwa pierwsze momenty centralne. Podano przybliżony opis analityczny własności sprężystych kilku modeli o strukturach aperiodycznych wykazujących polidispersję rozmiarów cząstek[46].

**Na zakończenie,** warto wspomnieć, że habilitant brał udział w badaniach teoretyczno - symulacyjnych w międzynarodowym, multidyscyplinarnym projekcie badawczym o charakterze doświadczalno - teoretycznym, który dotyczył badań ruchu komórek nowotworowych. Okazało

się, że komórki inwazyjne nowotworowe stosują jakościowo inną strategię ruchu niż ich nieinwazyjne odpowiedniki. Wyniki przeprowadzonych badań wskazują, że ruchy komórek zdrowych oraz rakowych podlegają odmiennym statystykom. Charakterystyczne zachowanie komórek rakowych tworzących przerzuty polega na tym, że wykonują one długie ukierunkowane wędrówki podobne do “skoków” (ruchów) Lévy’ego, które są dobrze przybliżane potęgowymi rozkładami statystycznymi. Z drugiej strony komórki nietworzące przerzutów można opisać zwykłym ruchem dyfuzyjnym. Bazując na przeprowadzonej analizie statystycznej sformułowano założenia modelu teoretycznego do opisu dynamiki ruchu komórek zdrowych jak i rakowych oraz przeprowadzono niezbędne symulacje komputerowe. Symulacje te jakościowo wyjaśniły charakterystyczne różnice ruchu komórek. Między innymi na podstawie tej wiedzy w badaniach użyto metod biologii molekularnej, za pomocą których udało się zmienić charakter ruchu komórek nowotworowych, które zamiast wykonywać długie ukierunkowane wędrówki, znowu miały charakter dyfuzyjny lub balistyczny. Wyniki tych badań zostały opublikowane w renomowanym międzynarodowym czasopiśmie *Nature Communications* w roku 2018[49]. Wkład habilitanta w te badania polegał na próbie stworzenia, wraz z innymi naukowcami, modelu teoretycznego opisującego ruch komórek nowotworowych zarówno tych dających przerzuty, jak i tych bez przerzutów.

#### Literatura do pkt. 4

- [1] J. A. Barker and D. Henderson. What is “liquid”? Understanding the states of matter. *Rev. Mod. Phys.*, 48: 587, 1976.
- [2] J. P. Hansen and I. R. McDonald. *Theory of Simple Liquids*. Academic Press, Amsterdam, The Netherlands, 2006.
- [3] D. Frenkel and A. J. C. Ladd. New Monte Carlo method to compute the free energy of arbitrary solids. Application to the fcc and hcp phases of hard spheres. *J. Chem. Phys.*, 81: pp. 3188–3193, 1984.
- [4] T. C. Hales. Historical overview of the Kepler conjecture. *Discrete Comput. Geom.*, 36: pp. 5–20, 2006.
- [5] T. C. Hales. A proof of the Kepler conjecture. *Annals of Mathematics*, 162: pp. 1065–1185, 2006.
- [6] L. V. Woodcock. Entropy difference between the face-centred cubic and hexagonal close-packed crystal structures. *Nature*, 385: pp. 141–143, 1997.
- [7] P. G. Bolhuis, D. Frenkel, S.-C. Mau, and D. A. Huse. Entropy difference between crystal phases. *Nature*, 388: pp. 235–236, 1997.
- [8] L. V. Woodcock. Entropy difference between crystal phases. *Nature*, 388: pp. 236, 1997.
- [9] K. V. Tretyakov and K. W. Wojciechowski. Efficient Monte Carlo simulations using a shuffled nested Weyl sequence random number generator. *Phys. Rev. E*, 60: pp. 7626–7628, 1999.
- [10] S.-C. Mau and D. A. Huse. Stacking entropy of hard-sphere crystals. *Phys. Rev. E*, 59: 4396, 1999.
- [11] W. G. Hoover and F. H. Ree. Melting transition and communal entropy for hard spheres. *J. Chem. Phys.*, 49(8): pp. 3609–3617, 1968.



- [12] K. J. Runge and G. V. Chester. Monte Carlo determination of the elastic constants of the hard-sphere solid. *Phys. Rev. A*, 36: pp. 4852–4858, 1987.
- [13] D. Frenkel and A. J. C. Ladd. Elastic constants of hard-sphere crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 59(10): p. 1169, 1987.
- [14] S. Pronk and D. Frenkel. Large difference in the elastic properties of fcc and hcp hard-sphere crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 90(25): 255501, 2003.
- [15] K. V. Tretyakov and K. W. Wojciechowski. Poisson’s ratio of the fcc hard sphere crystal at high densities. *J. Chem. Phys.*, 123: 074509, 2005.
- [16] S. P. Tokmakova. Stereographic projections of Poisson’s ratio in auxetic crystals. *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys.*, 242(3): pp. 721–729, 2005.
- [17] K. W. Wojciechowski. Poisson’s ratio of anisotropic systems. *Comp. Meth. Sci. Technol.*, 11: pp. 73–79, 2005.
- [18] F. Milstein and K. Huang. Existence of a negative Poisson ratio in fcc crystals. *Phys. Rev. B*, 19: pp. 2030–2033, 1979.
- [19] R. H. Baughman, J. M. Shacklette, A. A. Zakhidov, and S. Stafstrom. Negative Poisson’s ratios as a common feature of cubic metals. *Nature*, 392: pp. 362–365, 1998.
- [20] G. Milton. Composite materials with Poisson’s ratios close to -1. *J. Mech. Phys. Solids*, 40(5): pp. 1105–1137, 1992.
- [21] K. E. Evans. Auxetic polymers: a new range of materials. *Endeavour*, 15: pp. 170–174, 1991.
- [22] R. F. Almgren. An isotropic three-dimensional structure with Poisson’s ratio =-1. *J. Elast.*, 15: pp. 427–430, 1985.
- [23] A. G. Kolpakov. Determination of the average characteristics of elastic frameworks. *J. Appl. Math. Mech.*, 49: pp. 739–745, 1985.
- [24] J. N. Grima and K. E. Evans. Auxetic behavior from rotating squares. *J. Mater. Sci. Lett.*, 19: pp. 1563–1565, 2000.
- [25] K. W. Wojciechowski. Constant thermodynamic tension Monte Carlo studies of elastic properties of a two-dimensional system of hard cyclic hexamers. *Mol. Phys.*, 61: pp. 1247–1258, 1987.
- [26] K. W. Wojciechowski and A. C. Brańka. Negative Poisson ratio in a two-dimensional isotropic solid. *Phys. Rev. A*, 40: pp. 7222–7225, 1989.
- [27] K. W. Wojciechowski. Two-dimensional isotropic model with a negative Poisson ratio. *Phys. Lett. A*, 137: pp. 60–64, 1989.
- [28] R. S. Lakes. Foam structures with a negative Poisson’s ratio. *Science*, 235: pp. 1038–1040, 1987.
- [29] B. D. Caddock and K. E. Evans. Microporous materials with negative Poisson’s ratios i. microstructure and mechanical properties. *J. Phys. D-Appl. Phys.*, 22: pp. 1877–1882, 1989.

- [30] S. Hirotsu. Elastic anomaly near the critical point of volume phase transition in polymer gels. *Macromolecules*, 23: pp. 905–907, 1990.
- [31] X. Xu, Q. Zhang, M. Hao, Y. Hu, Zh. Lin, L. Peng, T. Wang, X. Ren, C. Wang, Z. Zhao, Ch. Wan, H. Fei, L. Wang, J. Zhu, H. Sun, W. Chen, T. Du, B. Deng, G. J. Cheng, I. Shakir, Ch. Dames, T. S. Fisher, X. Zhang, H. Li, Y. Huang, and X. Duan. Double-negative-index ceramic aerogels for thermal superinsulation. *Science*, 363(6428):723–727, 2019.
- [32] L. Rothenburg, A. A. Berlin, and R. J. Bathurst. Microstructure of isotropic materials with negative Poisson’s ratio. *Nature*, 354: pp. 470–472, 1991.
- [33] H. Kimizuka and H. Kaburaki. Mechanism for negative Poisson ratios over the  $\alpha$ - $\beta$  transition of cristobalite,  $\text{SiO}_2$ : A molecular-dynamics study. *Phys. Rev. Lett.*, 84(24): pp. 5548–5551, 2000.
- [34] I. Shufrin, E. Pasternak, and A. V. Dyskin. Hybrid materials with negative Poisson’s ratio inclusions. *Int. J. Eng. Sci.*, 89: pp. 100–120, 2015.
- [35] Wm. G. Hoover and C. G. Hoover. Searching for auxetics with DYNA3D and ParaDyn. *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys.*, 242(3): pp. 585–594, 2005.
- [36] K. V. Tretiakov and K. W. Wojciechowski. Elastic properties of soft sphere crystal from Monte Carlo simulations. *J. Phys. Chem. B*, 112: pp. 1699–1705, 2008.
- [37] P. M. Piglowski, K. W. Wojciechowski, and K. V. Tretiakov. Partial auxeticity induced by nanoslits in the Yukawa crystal. *Phys. Status Solidi-Rapid Res. Lett.*, 10: pp. 566–569, 2016.
- [38] T. Shepherd, K. Winwood, P. Venkatraman, A. Alderson, and T. Allen. Validation of a finite element modeling process for auxetic structures under impact. *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys.*, 257(10):1900197, 2020.
- [39] K. V. Tretiakov, P. M. Piglowski, and K. W. Wojciechowski. Auxeticity modifications and unit cell doubling in Yukawa fcc crystals with [001]-nanochannels filled by hard spheres. *Smart Mater. Struct.*, 32(2): 025008, 2023.
- [40] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Theory of Elasticity*. Pergamon Press, London, UK, 1986.
- [41] M. Parrinello and A. Rahman. Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method. *J. Appl. Phys.*, 52: pp. 7182–7190, 1981.
- [42] M. Parrinello and A. Rahman. Strain fluctuations and elastic constants. *J. Chem. Phys.*, 76: pp. 2662–2666, 1982.
- [43] K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, and M. Kowalik. Elastic properties of dense solid phases of hard cyclic pentamers and heptamers in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 67: 036121, 2003.
- [44] J. F. Nye. *Physical Properties of Crystals, Their Representation by Tensors and Matrices*. Clarendon Press, Oxford, UK, 1957.

- [45] M. Kowalik and K. W. Wojciechowski. Poisson's ratio of degenerate crystalline phases of three-dimensional hard dimers and hard cyclic trimers. *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys.*, 242: pp. 626–631, 2005.
  - [46] J. W. Narojczyk and K. W. Wojciechowski. Elastic properties of two-dimensional soft discs of various diameters at zero temperature. *J. Non-Cryst. Solids*, 352(40–41): pp. 4292–4298, 2006.
  - [47] J. W. Narojczyk, A. Alderson, A. R. Imre, F. Scarpa, and K. W. Wojciechowski. Negative Poisson's ratio behavior in the planar model of asymmetric trimers at zero temperature. *J. Non-Cryst. Solids*, 354(35–39): pp. 4242–4248, 2008.
  - [48] J. W. Narojczyk and K. W. Wojciechowski. Elasticity of periodic and aperiodic structures of polydisperse dimers in two dimensions at zero temperature. *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys.*, 245(11): pp. 2463–2468, 2008.
  - [49] S. Huda, B. Weigelin, K. Wolf, K. V. Tretyakov, K. Polev, G. Wilk, M. Iwasa, F. S. Emami, J. W. Narojczyk, M. Banaszak, S. Soh, D. Pilans, A. Vahid, M. Makurath, P. Friedl, G. G. Borisy, K. Kandere-Grzybowska, and B. A. Grzybowski. Lévy-like movement patterns of metastatic cancer cells revealed in microfabricated systems and implicated in vivo. *Nature Communications*, 9: 4539, 2018.
5. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

**2007, Uniwersytet w Bristolu, Wielka Brytania.** W trakcie 14-dniowej wizyty w grupie profesora Fabrizio Scarpy habilitant miał za zadanie stworzyć oprogramowanie stanowiące interfejs pomiędzy używanym ówczesnie programem do modelowania trójwymiarowych nanostruktur (JCrystalSoft, wersja 1.3.9) oraz programem ANSYS® R11. Stworzony (w całości przez habilitanta w języku C++) interfejs umożliwił badanie metodą elementów skończonych własności sprężystych nanorurek oraz struktur z nanorurek węglowych. Rozpoczęte w trakcie tej wizyty badania pokazały złożony mechanizm deformacji układów nanorurkowych, powstałych z połączenia dwóch nanorurek o różnych średnicach. Pokazano, że sam obszar złącza pomiędzy nanorurkami wykazuje ujemny współczynnik Poissona [Scarpa2011A]. Badania własności dynamicznych tych układów pokazały, że w porównaniu ze zwykłymi nanorurkami, obecność heterozłącza daje możliwość wykorzystania tych układów jako nanosensorów obciążenia [Scarpa2011B].

[Scarpa2011A] F. Scarpa, J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, *Unusual deformation mechanisms in carbon nanotube heterojunctions (5,5)-(10,10) under tensile loading*, *Phys. Status Solidi B* 248(1), 82-87, 2011

[Scarpa2011B] F. Scarpa, J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, *Self-filtering oscillations in carbon nanotube hetero-junctions*, *Nanotechnology* 22(46), 465501, 2011

**2011, Université du Maine, Laboratoire de Physique de L'Etat Condensé CNRS, Le Mans, Francja.** Wizyta 12-dniowa w ramach programu działań zintegrowanych POLONIUM 2011-2012, pt. *Własności strukturalne i magnetyczne nanokrystalicznych związków międzymetalicznych wzbogaconych w <sup>57</sup>Fe wytwarzanych metodą szybkiego schładzania*, koordynowanego ze strony polskiej przez prof. dr hab. B.Idzikowskiego z IFM PAN. W trakcie

wizyty na wydziale Fizyki Ciała Stałego Uniwersytetu w Le Mans nawiązano współpracę z prof. Y. Labaye w obszarze badań własności magnetycznych materiałów, metodą symulacji komputerowych. Bezpośrednim wynikiem tej współpracy było stworzenie oprogramowania komputerowego do symulacji uporządkowania spinów w materiałach krystalicznych. Program zawierał implementacje metody Monte Carlo na podstawie modelu Heisenberga z uwzględnieniem oddziaływania wymiany oraz energii anizotropii. Pozwalał na badanie krystalicznych struktur ferromagnetycznych i antyferromagnetycznych.

**2012, Université du Maine, Laboratoire de Physique de L'Etat Condensé CNRS, Le Mans, Francja.** Wizyta 12-dniowa w ramach programu działań zintegrowanych POLONIUM 2011-2012, pt. *Własności strukturalne i magnetyczne nanokrystalicznych związków międzymetalicznych wzbogaconych w  $^{57}\text{Fe}$  wytwarzanych metodą szybkiego schładzania*, koordynowanego ze strony polskiej przez prof. dr hab. B. Idzikowskiego z IFM PAN. W trakcie wizyty drugiej na wydziale Fizyki Ciała Stałego Uniwersytetu w Le Mans kontynuowano, wspólnie z prof. Y. Labaye rozpoczęte uprzednio prace nad programem do prowadzenia obliczeń dla struktur nieuporządkowanych (szkieł i materiałów amorficznych) wykorzystującego algorytm klastrów magnetycznych (ang. *Magnetic Cluster Algorithm*). Celem prac było stworzenie algorytmu do obliczeń właściwości termodynamicznych i magnetycznych (w tym efektu magneto-kalorycznego) dla stopów wieloskładnikowych. Przy współudziale habilitanta, powstały dwa poniższe artykuły:

[Sniadecki2012] Z. Śniadecki, J. W. Narojczyk, B. Idzikowski, *Calculation of glass forming ranges in the ternary Y-Cu-Al system and its sub-binaries based on geometric and Miedema's models*, Intermetallics 26, 72-77, 2012

[Sniadecki2014] Z. Śniadecki, J. W. Narojczyk, B. Idzikowski, *Semi-empirical modelling of glass forming ranges for Y-Co-Si system*, Acta Phys. Pol. A 126(1), 62-63, 2014

**2016, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS, Universite de Rennes 1, Rennes, Francja.** Wizyta 6-dniowa w ramach programu działań zintegrowanych POLONIUM na lata 2016-2017, pt. *Wielofunkcyjne chromofory ciekłokrystaliczne pochodnych bipirymidyny do trójwymiarowego (3CD) przechowywania danych*, koordynowanego ze strony polskiej przez dr hab. Przemysława Kędziórę z IFM PAN. Grupa polska przeprowadziła badania mikroskopowe, transmisji światła, dielektryczne i rozpraszania Hyper-Rayleigh, zsyntetyzowanych przez grupę francuską, dwóch nowych chiralnych chromofor pochodnych bipirymidyny. Badania te wykazały, że oktopolarne chromofory organizują się w prawo- i lewoskrętne agregaty supramolekularne. Ponadto wykryto, że obie pochodne w pewnym zakresie temperatur wykazują własności ciekłokrystaliczne. Związki o takiej strukturze dają się łatwo przekształcić w samoorganizujące się, elastyczne cienkie filmy. Oprócz silnej fluorescencji i absorpcji dwufotonowej materiały te wykazują także generację drugiej harmonicznej podczas naświetlania światłem laserowym. Habilitant prowadził konsultacje z grupą francuską na temat możliwości symulacji komputerowych struktur tych związków.

**2018, MTA Centre for Energy Research, Budapeszt, Węgry.** Wizyta 6-dniowa w ramach programu wymiany bezdewizowej między Polską Akademią Nauk i Węgierską Akademią Nauk. W trakcie wizyty wspólnie z zespołem węgierskim pod kierownictwem prof. Attila Imre, konsultowane były wyniki dotyczące analizy układów metastabilnych (cieczy, ciał stałych znajdujących się w warunkach ujemnego ciśnienia). Wynikiem współpracy jest artykuł [Imre2018], w którym pokazano, że dla układów pod ciśnieniem  $p = 0$  (zakładając ogólną słuszność  $\delta W \equiv dW_p = -pdV$ ) mogą istnieć procesy, dla których praca objętościowa wynosi zero podczas izobarycznej wymiany ciepła z otoczeniem. Oznacza to, że istnieje taki stan ( $p = 0$ ),

w którym może zachodzić proces makroskopowej zmiany objętości poprzez izobaryczne ogrzewanie lub chłodzenie, bez pracy wykonanej przez system na jego otoczeniu lub przez otoczenie na układzie.

[Imre2018] A. R. Imre, K. W. Wojciechowski, G. Györke and A. Groniewsky, J. W. Narojczyk, *Pressure-volume work for metastable liquid and solid at zero pressure*, Entropy 20, 338, 2018

**2019, MTA Centre for Energy Research, Budapeszt, Węgry.** Wizyta 6-dniowa w ramach programu wymiany bezdewizowej między Polską Akademią Nauk i Węgierską Akademią Nauk. Wynikiem współpracy z prof. A. Imre, prowadzonej od poprzedniej wizyty jest artykuł [H2], w którym pokazano silny wpływ inkluzji twardych cząstek o innych średnicach niż cząstki kryształu f.c.c., do którego wprowadzono inkluzję. W trakcie wizyty habilitant prowadził konsultacje z prof. Imre na temat możliwych zachowań współczynnika Poissona w modelowych układach binarnych twardych kul z nanowartstwami i nanokanałami, tworzącymi sieci o różnych symetriach.

**2022, Aerospace Engineering, University of Bristol, Wielka Brytania.** W trakcie ponad trzymiesięcznego stażu, w ramach realizacji projektu NCN MINIATURA-5, który został odbyty w grupie prof. Fabrizio Scarpy na Uniwersytecie w Bristolu, prowadzone były badania dotyczące wpływu dodatkowych więzów, w postaci wiązań molekularnych, nałożonych na inkluzje wprowadzone do kryształu f.c.c. twardych kul. Badane układy zawierały inkluzje w postaci sieci nanokanałów o niewielkich średnicach, zorientowanych w kierunku [001], wypełnionych dwuatomowymi molekułami (twardymi dimerami). Wyniki porównano z analogicznym modelem złożonym jedynie z twardych kul [Narojczyk2019]. Zbadano dwa przypadki: (i) w którym środki kul tworzących molekułę dimeru znajdowały się zawsze w odległości  $\sigma$  od siebie (niezależnie od aktualnej wartości  $\sigma'$ ), oraz (ii) w którym środki tych kul znajdowały się od siebie w odległości  $\sigma'$ . W każdym z tych przypadków rozważono dwa rozmiary nanokanałów o średnicach zawierających odpowiednio jedną lub dwie strefy koordynacyjne cząstek. Wyniki prac na tym projekcie zostały przedstawione w artykule [Narojczyk2023].

[Narojczyk2019] J. W. Narojczyk, K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov, J. Smardzewski, F. Scarpa, P. M. Piękowski, M. Kowalik, A. R. Imre, M. Bilski, *Auxetic properties of a f.c.c. crystal of hard spheres with an array of [001]-nanochannels filled by hard spheres of another diameter*, Phys. Status Solidi B 256, 1800611, 2019.

[Narojczyk2023] J. W. Narojczyk, *The f.c.c. crystals of hard spheres with an array of [001]-nanochannel inclusions filled by the simplest hard sphere molecules*, Computational Methods in Science and Technology (accepted for publication) DOI: 10.12921/cmst.2023.0000023, 2023.

6. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę.

6.1. Działalność dydaktyczna

Działalność dydaktyczna w ramach zatrudnienia w Państwowej Wyższej Szkole Zawodowej im. Prezydenta S. Wojciechowskiego w Kaliszu

- 2009 – 2011 *Informatyka w zarządzaniu* (laboratorium) na kierunkach: Zarządzanie bezpieczeństwem, Zarządzanie w instytucjach samorządowych.
- 2010 – 2011 *Języki programowania* (wykład i ćwiczenia) na kierunku Elektrotechnika.
- 2010 – 2011 *Języki programowania obiektowego* (wykład i ćwiczenia) na kierunku: Mechanika i budowa maszyn.
- 2011 – 2014 *Analiza matematyczna* (ćwiczenia) na kierunku: Informatyka.
- 2011 – 2015 *Podstawy elektroniki i miernictwa* (laboratorium) na kierunku: Informatyka.
- 2012 – 2014 *Computer science* w języku angielskim, w ramach programu ERASMUS.
- 2014 – 2015 *Technologia informacyjna* (wykład i laboratorium) na kierunku: Ratownictwo medyczne

Pozostała działalność dydaktyczna

- 2010 “*Computer simulations of the shape and size dispersion influence on the Poisson’s ratio in static models*” wykład (w języku angielskim) na międzynarodowych warsztatach dla studentów i doktorantów Computational Nanotechnology, Politechnika Gdańska, Gdańsk.
- 2011 “*Simulations with Classical Particles*” cykl wykładów (w języku angielskim) na międzynarodowych warsztatach dla studentów i doktorantów Computational Nanotechnology, Politechnika Gdańska, Gdańsk.
- 2018 “*Auxetic Materials at Nanoscale*” wykład na: 4<sup>th</sup> VIPER (Vibroacoustics of PERiodic media) School on Composite Structures and Manufacturing and Auxetic Composites and Systems, organizowanej przez Uniwersytet w Bristolu, 15-17 październik 2018 Bristol, Wielka Brytania.



## 6.2. Działalność organizacyjna

- 2004** *The Workshop on Auxetics and Related Systems*, 27 – 30 czerwca 2004, Będlewo k. Poznania. Organizowane przez Instytut Fizyki Molekularnej, Polskiej Akademii Nauk. Członek Komitetu Organizacyjnego.
- 2005** 2<sup>nd</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, 19 – 23 sierpnia 2005, Będlewo k. Poznania. Organizowane przez Instytut Fizyki Molekularnej, Polskiej Akademii Nauk przy współpracy z Poznańskim Centrum Superkomputerowo Sieciowym, Politechniką Poznańską, University of Bolton (Wielka Brytania), University of Bristol (Wielka Brytania). Członek Komitetu Organizacyjnego, sekretarz konferencji.
- 2006** *U.S.–Poland Workshop on Nanoscience and Nano-Structured Materials*, 26 – 28 czerwca 2006, Poznań. Organizowane przez Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu przy współpracy z Instytut Fizyki Molekularnej, Polskiej Akademii Nauk, Politechnika Poznańska, Vanderbilt University (USA), North Carolina State University (USA), University of Wyoming (USA). Członek Komitetu Organizacyjnego.
- 2011** 8<sup>th</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, 6 – 9 września 2011, Szczecin. Organizowane przez Instytut Fizyki Molekularnej, Polskiej Akademii Nauk przy współpracy z Politechniką Gdańską, University of Bristol (Wielka Brytania), University of Bolton (Wielka Brytania), University of Malta (Malta), University of Athens (Grecja). Członek Komitetu Organizacyjnego, sekretarz konferencji.
- 2014** 5<sup>th</sup> *International Conference Auxetics and other materials and models with "negative" characteristics* and 10<sup>th</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, 15 – 19 września 2014, Poznań. Organizowane przez Instytut Fizyki Molekularnej, Polskiej Akademii Nauk przy współpracy z Poznańskim Centrum Superkomputerowo Sieciowym. Członek Komitetu Organizacyjnego, sekretarz konferencji, współredaktor książki abstraktów ISBN: 978-83-933663-0-9.
- 2016** 7<sup>th</sup> *International Conference Auxetics and other materials and models with "negative" characteristics* and 12<sup>th</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, 12 – 16 września 2016, Szymbark. Organizowane przez Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Politechniki Gdańskiej, oraz Polskie Towarzystwo Fizyczne oddział Gdańsk. Członek Komitetu Organizacyjnego, sekretarz konferencji, współredaktor książki abstraktów ISBN: 978-83-937979-9-8.
- 2017** 8<sup>th</sup> *International Conference Auxetics and other materials and models with "negative" characteristics* and 13<sup>th</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, 11 – 15 września 2017, Heraklion (Kreta), Grecja. Organizowane przez National and Kapodistrian University of Athens (Grecja) we współpracy z Zachodniopomorskim Uniwersytetem technologicznym w Szczecinie oraz Polskie Towarzystwo Fizyczne oddział Gdańsk. Członek Komitetu Organizacyjnego, sekretarz konferencji, współredaktor książki abstraktów ISBN: 978-83-7712-172-6.
- 2019** 10<sup>th</sup> *International Conference Auxetics and other materials and models with "negative" characteristics* and 15<sup>th</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, 2 – 6 września 2019, Będlewo k. Poznania. Organizowane przez Instytut Fizyki Molekularnej, Polskiej Akademii Nauk. Członek Komitetu Organizacyjnego, sekretarz konferencji, współredaktor książki abstraktów ISBN: 978-83-933663-8-5.

### 6.3. Popularyzacja nauki

W ramach popularyzacji nauki habilitant brał udział w poniżej wymienionych inicjatywach organizowanych przez Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu:

- **Wykład** pt. “*Wpływ nieporządku sieci krystalicznej na współczynnik Poissona w materiałach auksetycznych*,” wygłoszony 7 lipca 2017 w ramach warsztatów naukowych, dla młodzieży liceów i techników oraz studentów, Lato z Helem 2017, organizowanych przez Instytut Fizyki Molekularnej PAN, odbywających się w Odolanowie.
- **Wykład** pt. “*Aplikacje open source w badaniach naukowych – na przykładzie komputerowych symulacji własności sprężystych wybranych materiałów modelowych*” wygłoszony 26 września 2017 w ramach wydarzenia *Software Freedom Day* organizowanego przez Politechnikę Poznańską, mającego na celu promocję wykorzystywania wolnego oprogramowania w nauce.
- **Wykład** pt. “*Auksetyki – materiały inne niż wszystkie*” wygłoszony 17 stycznia 2020 w ramach inicjatywy **Fizyka Warta Poznania** (FWP). Jest to cykl wykładów kierowany do dzieci i młodzieży, które rozpoczynają swoją przygodę z fizyką, jak również do tych, którzy chcą poszerzyć swoją wiedzę i horyzonty o informacje z renomowanego instytutu badawczego. Dzięki staraniom organizatorów, w 2022 roku projekt FWP otrzymał finansowanie Ministerstwa Edukacji i Nauki w programie “*Społeczna Odpowiedzialność Nauki*” w module “*Społeczna odpowiedzialność nauki – Popularyzacja nauki i promocja sportu*” SONP/SP/512667/2021.
- **Udział** w wydarzeniu **Noc Naukowców** organizowanej 27 listopada 2020 w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN, pod hasłem *W Labiryncie Fizyki*. Habilitant wykonywał **pokazowe eksperymenty** dla dzieci i młodzieży.
- **Udział** w wydarzeniu **Noc Naukowców** organizowanej 30 września 2022 w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN, pod hasłem *W Labiryncie Fizyki*. Ze względu na sytuację związaną z COVID-19, ta edycja była prowadzona w formie *on-line*. Habilitant przygotował jedenastominutowy **film** pt. *Auksetyki – materiały przyszłości*.

7. Oprócz kwestii wymienionych w pkt. 1-6, wnioskodawca może podać inne informacje, ważne z jego punktu widzenia, dotyczące jego kariery zawodowej.

Badania naukowe prowadzone przez habilitanta realizowane są z wykorzystaniem metod numerycznych i symulacji komputerowych. Oprogramowanie niezbędne do wykonania wszystkich potrzebnych symulacji zostało stworzone w języku C/C++ w całości przez habilitanta. Ponadto niezbędne narzędzia programistyczne służące do wizualizacji struktur badanych modeli również zostało stworzone przez habilitanta w języku C++ z wykorzystaniem technologii graficznych OpenGL. Wszystkie potrzebne symulacje były wykonywane przez habilitanta na klastrze komputerowym w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN lub z wykorzystaniem zasobów obliczeniowych Poznańskiego Centrum Superkomputerowo Sieciowego. Obie infrastruktury obliczeniowe działają w środowisku UNIX/Linux, dla tego do prowadzenia symulacji na niezbędną skalę wymagana jest również biegła znajomość architektury systemu Linux oraz umiejętność tworzenia skryptów w języku BASH.

Od 2017 roku habilitant jest kierownikiem grantów obliczeniowych przyznanych przez Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe na dostęp do infrastruktury obliczeniowej dużej mocy. W ramach tych grantów habilitant ma dostęp do klastra Eagle opartego na architekturze Intel Xeon Platinum 8268, w którego skład wchodzi aktualnie 1320 dwuprocesorowych węzłów, co daje ponad 63000 rdzeni obliczeniowych zapewniających łącznie 4,4 TFLOPS mocy obliczeniowej.

**2017 – 2022** Grant PCSS nr 323 pt. *“Komputerowe modelowanie inkluzji w wybranych modelach kryształów kubicznych”*. Przyznano 24 900 000 godzin CPU.

**2022 – 2025** Grant PCSS nr 564 pt. *“Kryształy f.c.c. twardych kul z inkluzjami atomowymi i molekularnymi - porównanie auksetyczności”*. Przyznano 21 000 000 godzin CPU.

W wyniku aktywnego udziału w organizację konferencji 8<sup>th</sup> *Workshop on Auxetics and Related Systems*, która odbyła się 6 – 9 września 2011 w Szczecinie, habilitant został zaproszony do współredagowania (jako *“quest editor”*) poświęconego materiałom auksetycznym zeszytu tematycznego *Physica Status Solidi B* Vol. 249, No. 7, pp. 1315-1421, lipiec 2012

.....  
Jakub W. Narojczyk

