

Symulacje komputerowe wybranych modeli nanokompozytów

Miejsce realizacji: Zakład Fizyki Komputerowej Układów Złożonych
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=10>
Oddział Fizyki Miękkiej Materii i Materiałów Funkcyjnych
IFM PAN w Poznaniu, Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań

Kontakt: Opiekun: dr hab. inż. Konstantin V. Tretiakov, prof. IFM PAN
kvt@ifmpan.poznan.pl
<http://www.ifmpan.poznan.pl/~kvt/>

Wprowadzenie:

Materiały składające się z okresowo powtarzających się sekwencji dwóch lub więcej warstw różnych substancji mają często właściwości fizyczne, które różnią się znacząco od tych samych właściwości ich składników [1]. Jest to podstawowa cecha materiałów kompozytowych, które są coraz popularniejsze w dzisiejszym świecie [2]. Ta popularność wynika z ich niezwykłych właściwości, które są wykorzystywane, na przykład przy konstruowaniu hamulców samolotów [3], w elektronice [4], lub jako katalizatory, adsorbenty i w innych zastosowaniach [5]. Z drugiej strony, gwałtowny rozwój nanotechnologii, w ostatnich latach, zintensyfikował badania różnych zjawisk fizycznych i chemicznych w skali nano w wielu dziedzinach nauki i techniki [6-9].

Połączenie tych dwóch wyżej wspomnianych czynników spowodowało powstanie nowej dziedziny naukowej, której głównym celem jest zdobywanie i poszerzanie wiedzy, zarówno teoretycznej jak i praktycznej, w zakresie materiałów nano-kompozytowych. Proponowana tematyka pracy doktorskiej całkowicie mieści się w zakresie tej dziedziny i dotyczy ona modeli nanokompozytów, a właściwie badania ich podstawowych własności fizycznych (np. takich jak współczynniki transportu lub własności sprężyste). Warto tu może dodać, że jedną z takich nietypowych i pożądanых właściwości materiałów jest auksetyczność [10-12]. Materiały auksetyczne mają ujemny współczynnik Poissona - zwiększają wymiary poprzeczne, gdy są rozciągnięte w kierunku wzdłużnym i vice versa kurczą się poprzecznie pod ścisaniem. Materiały te mają różne zastosowania, co czyni je przedmiotem intensywnych badań na różnych poziomach, zarówno mikroskopowym [14-17], jak i makroskopowym [18-20].

Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze.

Celem pracy jest zbadanie podstawowych własności fizycznych modeli nanokompozytów za pomocą metod symulacji komputerowych, takich jak metoda Monte Carlo i Dynamika Molekularna. Badania te mogą pomóc w sformułowaniu podstawowych warunków dotyczących struktury materiału i/lub rodzaju oddziaływań międzycząsteczkowych niezbędnych do uzyskania nanokompozytów o pożądanых właściwościach fizycznych.

Referencje.

- [1] [1] T. W. Barbee Jr., MRS Bull. 15, 17–18 (1990).
- [2] R. M. Jones, Mechanics of Composite Materials, 2nd edition (Taylor & Francis, 1999).
- [3] J. G. Rao, K. H. Sinnur, and R. K. Jain, Int. J. Compos. Mater. 5, 89–96 (2015).
- [4] S. Stankovich, D. A. Dikin, G. H. Dommett, K. M. Kohlhaas, E. J. Zimney, E. A. Stach, R. D. Piner, S. T. Nguyen, and R. S. Ruoff, Nature 442, 282–286 (2006).
- [5] M. E. Davis, Nature 417, 813–821 (2002).
- [6] X. Hou, H. Zhang, and L. Jiang, Angew. Chem. Int. Ed. 51, 5296 (2012).
- [7] W. Zeng, L. Shu, Q. Li, S. Chen, F. Wang, and X. M. Tao, Adv. Mater. 26, 5310 (2014).

- [8] M. Bacon, S. J. Bradley, and T. Nann, *Part. Part. Syst. Charact.* 31, 415 (2014).
- [9] S. Wang, Y. Xie, S. Niu, L. Lina, and Z. L. Wang, *Adv. Mater.* 26, 2818 (2014).
- [10] R. S. Lakes, *Science* 238, 551 (1987).
- [11] K. E. Evans, M. A. Nkansah, I. J. Hutchinson, and S. C. Rogers, *Nature* 353, 124–124 (1991).
- [12] T. C. Lim, *Auxetic Materials and Structures* (Springer, Singapore, 2015).
- [13] Y. Wang and Y. Ding, *Phys. Status Solidi RRL* 7, 410–413 (2013).
- [14] K. W. Wojciechowski, *Phys. Lett. A* 137, 60 (1989).
- [15] K. V. Tretyakov, *J. Non-Cryst. Solids* 355, 1435 (2009).
- [16] K. V. Tretyakov, P. M. Piękowski, K. Hyżorek and K. W. Wojciechowski, *Smart Mater. Struct.* 25, 054007 (2016).
- [17] P. M. Piękowski, K. W. Wojciechowski, and K. V. Tretyakov *Phys. Status Solidi RRL* 10, 566 (2016).
- [18] L. Mizzi, K. M. Azzopardi, D. Attard, J. N. Grima, and R. Gatt, *Phys. Status Solidi RRL* 9, 425 (2015).
- [19] J. Aw, H. Zhao, A. Norbury, L. Li, G. Rothwell, and J. Ren, *Phys. Status Solidi B* 252, 1526 (2015).
- [20] A. Slann, W. White, F. Scarpa, K. Boba, and I. Farrow, *Phys. Status Solidi B* 252, 1533 (2015).