

Symulacje komputerowe wybranych modeli materiałów funkcyjnych o własnościach sprzecznych z intuicją

Miejsce realizacji: Instytut Fizyki Molekularnej PAN
Zakład Fizyki Komputerowej Układów Złożonych
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=10>
Oddział Fizyki Miękkiej Materii i Materiałów Funkcyjnych

Kontakt: *Opiekun:* prof. dr hab. Krzysztof W. Wojciechowski
kww@ifmpan.poznan.pl lub kww@man.poznan.pl

Wprowadzenie:

Materiały funkcyjne stają się coraz ważniejsze w nauce, technice oraz wielu ważnych dziedzinach działalności współczesnych ludzi (medycyna, sport, obronność, ...). Działanie takich materiałów często związane jest z ich anomalnymi właściwościami fizycznymi. Dlatego poznanie, zrozumienie i poprawny opis mechanizmów prowadzących do anomalnych właściwości materiałów jest istotne nie tylko z punktu widzenia badań podstawowych, ale i – a raczej przede wszystkim – ze względu na wielość możliwych zastosowań. W Zakładzie Fizyki Komputerowej Układów Złożonych badane są za pomocą symulacji komputerowych różne (począwszy od skali molekularnej a skończywszy na skali makroskopowej) modele materiałów wykazujących właściwości ekstremalne (twardość, tłumienie, itp.) oraz zachowania sprzeczne z intuicją, do jakich należą między innymi: auksetyki, układy z ujemną ściśliwością liniową i powierzchniową, układy z ujemnym współczynnikiem rozszerzalności cieplnej itp. Proponowana rozprawa doktorska dotyczy tej właśnie tematyki.

Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze:

Celem pracy jest stworzenie i zbadanie za pomocą symulacji komputerowych modeli materiałów wykazujących wybrane ekstremalne lub anomalne właściwości fizyczne.