

Struktura materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych na poziomie atomowym w ujęciu metod dynamiki molekularnej i analizy topologicznej

dr Marcela Trybuła

Institut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN

Każdy materiał charakteryzuje się pewnym uporządkowaniem w skali atomowej, które wpływa na jego właściwości fizyczne (np. lepkość, gęstość, napięcie powierzchniowe) oraz chemiczne (np. reaktywność, odporność na korozję). Metody dynamiki molekularnej umożliwiają poznanie na poziomie atomowym uporządkowania atomowego w materiale i jego zachowania podczas zmiany składu chemicznego, czynników zewnętrznych (temperatura, ciśnienie). Uzupełnieniem metod symulacji atomistycznych są metody badania struktury, właściwości materiałów jak również analizy topologicznej do opisu sieci atomów i ich połączeń.

Głównym celem prowadzonych badań był opis struktury i właściwości materiałów krystalicznych, amorficznych i ciekłych metodami dynamiki molekularnej i analizy topologicznej. Dla ciekłych metali i stopów, badania dotyczyły opisu struktury i jej wpływu na właściwości w ciekłych metalach i stopach w ujęciu metody analizy Woronoja z możliwością jej rozszerzenia dla materiałów polikrystalicznych. Dla materiałów amorficznych - opisu struktury i kinetyki wzrostu cienkich filmów na podłożu krystalicznym w ujęciu reaktywnej metody dynamiki molekularnej i analizy topologicznej.

Dla ciekłych metali i stopów, najważniejszym osiągnięciem było wykazanie, że lokalne uporządkowanie ikosaedryczne bliskiego zasięgu (ISRO) ma korzystny wpływ na stabilizację stanu ciekłego, co wynika z ich gęsto upakowanej struktury i wpływu na zachowanie właściwości transportowych, termodynamicznych jak również kąt zwilżania czy powierzchnię rozplwy. Dla materiałów krystalicznych w ujęciu metody analizy Woronoja, istotnym osiągnięciem jest możliwość identyfikacji i opis „cech topologicznych” („topological features”) uporządkowania atomów oraz uzyskanie jasnego obrazu znaczenia „cech topologicznych” uporządkowania atomowego ma strukturę rdzenia granicy ziarna i jego grubości. Dla materiałów amorficznych, ważnym osiągnięciem była możliwość analizy topologii sieci atomów i połączeń w ultracienkich warstwach tlenkowych. Co więcej potwierdzenie obecności naprężenia ściskającego na początkowych etapach utleniania i jego wpływu na różnicę w strukturze i topologii sieci atomów i ich połączeń dla dwóch powstałych ultracienkich warstw tlenku na podłożu Al(100) i Al(111).

Podsumowując, najważniejszym osiągnięciem było pokazanie, że dynamika molekularna w połączeniu z analizą Woronoja otwiera nowe możliwości i perspektywy do badania zależności struktura-właściwości materiałów poddanych różnym czynnikom zewnętrznym. W rezultacie uzyskano spójny i zwarty opis struktury i jej wpływu na właściwości badanych materiałów.