

Streszczenie pracy doktorskiej
pt. „WŁASNOŚCI TERMODYNAMICZNE I DYNAMICZNE ANIZOTROPOWYCH
MODELI ELIPSOIDALNYCH BADANE METODĄ SYMULACJI DYNAMIKI
MOLEKULARNEJ”

Rozprawę doktorską stanowi zbiór tematycznie powiązanych artykułów naukowych opublikowanych w recenzowanych czasopismach. Celem pracy doktorskiej jest zbadanie wpływu anizotropii oddziaływań międzymolekuarnych na dynamikę molekularną cieczy tworzących szkła.

Na początku XXI wieku wykazano skalowanie się danych eksperymentalnych potwierdzone, dla ponad 100 różnych substancji. Zauważony wtedy fenomen został nazwany koncepcją skalowania gęstościowego. Początkowo powiązano ten fenomen z oddziaływaniem potencjału Lennarda-Jonesa, łącząc wykładnik odpychający potencjału z wykładnikiem skalującym. Na tej podstawie wyprowadzono później teorię izomorfów, która łączy wartość wykładnika skalującego z wartością nachylenia korelacji wiriału i energii potencjalnej. Na tej samej podstawie wyprowadzono później równanie stanu, które również zwracało tę samą wartość współczynnika skalującego, sukcesywnie skalującego wówczas dane z symulacji komputerowych. Niestety, zastosowanie zaproponowanych metod w przypadku cieczy rzeczywistych prowadziło do sporych różnic w wykładnikach rzeczywiście skalujących dane termodynamiczne, w stosunku do tych uzyskanych z proponowanych metod.

Powodem tych rozbieżności wydaje się być fakt, że kształt rzeczywistych molekuł nie jest izotropowy. Poprowadziło to do zamodelowania cieczy przechodzonych w symulacjach komputerowych za pomocą anizotropowego potencjału Gaya-Berna co wykonano w artykule 1. Zastosowanie anizotropowego potencjału umożliwiło uzyskanie eksperymentalnie obserwowanej rozbieżności pomiędzy wykładnikami skalującymi dane dynamiczne i dane wolumetryczne. Ważnym wnioskiem płynącym z przeprowadzonych analiz jest także wykazana korelacja wartości wykładnika skalującego dane dynamiczne, do wielkości anizotropii, która w tym przypadku oznaczała stosunek długości do szerokości molekuly. W dalszej części pracy zaproponowane w ramach koncepcji skalowania gęstościowego metody wyznaczania wykładnika skalującego dane dynamiczne, zostały szczegółowo przeanalizowane pod kątem zastosowania ich w modelach anizotropowych. Wyniki tych analiz ukazują, że zaproponowane dotychczas metody oparte między innymi o równanie stanu czy współczynnik nachylenia korelacji wiriału i energii potencjalnej, dają niepoprawne wartości wykładnika skalującego dane dynamiczne. Tylko jedna koncepcja kryterium izochronicznego dała poprawną wartość wykładnika skalującego, co potwierdza wcześniejsze wnioski z eksperymentów rzeczywistych. W pracy znajdują się także analizy związku entropi z koncepcją skalowania termodynamicznego ukazanych w artykule 2. Wartość entropi konfiguracyjnej, która dla tego typu eksperymentów została z sukcesem wyznaczona po raz pierwszy, podlega prawu skalowania gęstościowego. Entropia konfiguracyjna skaluje się z tym samym wykładnikiem co czasy relaksacji strukturalnej. Z przeprowadzonych analiz wynika ponadto, że zasugerowana alternatywna koncepcja stosowania entropi nadmiarowej, w stosunku do entropi gazu doskonałego, nie spełnia prawa skalowania gęstościowego.

Głównym wynikiem przedstawionej pracy jest fakt, że anizotropia odgrywa kluczową rolę w modelowaniu dynamiki molekularnej cieczy tworzących szkła.