

Tomasz Kozik

Akademia Górniczo-Hutnicza im.
Stanisława Staszica w Krakowie

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Streszczenie pracy doktorskiej mgr inż. Tomasza Kozika pt.

Modeling of the structure of molecular and macromolecular systems using molecular dynamics and artificial intelligence as complementary methods

Polimery stały się jednymi z najbardziej rozpowszechnionych materiałów we współczesnym świecie. Zakres ich aplikacji jest bardzo szeroki i obejmuje tak skrajnie różne zastosowania jak pakowanie (m.in. polietylen), budownictwo (m.in. polistyren) i nanotechnologia (w tym np. OLEDy).

Wobec tak powszechnych i różnorodnych zastosowań polimerów, dużego znaczenia nabiera praca poświęcona ich badaniu, w tym między innymi ich struktury. Długie, łańcuchowe makromolekuły polimerów tworzą na ogół w większości bezładnie splątana masę, pośród której jednak znaleźć można niewielkie obszary cechujące się wysokim stopniem uporządkowania. Krystality polimerowe, choć niewielkie, mogą mieć znaczący wpływ na własności całego materiału.

Określenie struktury krystalitu polimerowego może się okazać zaskakująco trudne. Choć oddziałują one z promieniowaniem rentgenowskim podobnie jak kryształy nieorganiczne, dają obraz dyfrakcyjny zawierający niewiele, bardzo niejednoznacznych danych, które w połączeniu ze znacznym stopniem skomplikowania struktury powodują, iż jej ustalenie staje się niewykonalne przy użyciu typowych metod.

Niniejsza praca poświęcona jest zastosowaniu dwóch odmiennych technik obliczeniowo-symulacyjnych do badania struktury polimerów, co stanowiło zarazem jeden z jej nadrzędnych celów. Drugim celem było sformułowanie metodologii pracy pozwalającej na systematyczne wyznaczanie struktury krystalitów polimerowych na podstawie eksperymentalnych danych dyfrakcyjnych w przypadkach, w których nie jest to możliwe w oparciu o typowe metody.

Pierwszą z wykorzystanych metod była dynamika molekularna (MD), pozwalająca na symulację zachowania poszczególnych atomów tworzących badaną strukturę pod wpływem występujących w niej oddziaływań. Drugą była sztuczna inteligencja (AI), a konkretnie algorytmy typu AI służące do szeroko pojętej optymalizacji, oparte o tzw. inteligencję stadną (rojową), w których interakcja pomiędzy prostymi jednostkami realizującym pozornie prosty program ruchu w przestrzeni rozwiązań prowadzi do powstania bardziej złożonego systemu społecznego, który może zostać wykorzystany do rozwiązania problemu optymalizacyjnego

W ramach pracy zrealizowane zostały trzy odrębne tematy badawcze, w ramach których przeprowadzono obliczenia i symulacje o istotnym wpływie na wiedzę o układach, których dotyczyły.

Celem pierwszego było znalezienie komórki elementarnej opisującej strukturę krystalitu systemu polimerowego powstałego w wyniku domieszkowania polianiliny (PANI) kwasem kamforosulfonowym (CSA). W toku realizacji projektu stworzono oprogramowanie do optymalizacji komórki elementarnej pod kątem zgodności ze składową krystaliczną dyfraktogramu eksperymentalnego. Sformułowano też metodologię pracy łączącą optymalizację i wykorzystanie symulacji MD. Wynikiem przeprowadzonych badań było zaproponowanie w pełni zgodnego z różnymi eksperymentami modelu komórki elementarnej PANI/CSA, którego do tej pory brakowało w literaturze.

Tematem drugiego z realizowanych projektów była symulacja oddziaływania pomiędzy wybranymi molekularnymi warstwami samoorganizującymi się (SAM) na bazie tioli a poli(metakrylanem metylu), zwanym też PMMA lub pleksiglasem. Celem symulacji było wyjaśnienie mechanizmu oddziaływania pomiędzy tymi strukturami. Oddziaływanie takiego układu, zdeponowanego na powierzchni złota (111), wpływa na pracę wyjścia całego układu.

Celem realizacji trzeciego zagadnienia tematycznego było określenie struktury oraz zbadanie dynamiki różnych układów polimerowych typu domieszkowanego poli(etylenodioksytiofenu) PEDOT. Wyniki wykazały, iż struktury różnych systemów mogą być bardzo odmienne, a nie jak wcześniej zakładano podobne.

Kraków, 30.09.2019