

STRESZCZENIE

W ramach niniejszej rozprawy doktorskiej przeprowadzone zostały symulacje komputerowe wykorzystujące kilka odmian metody Monte Carlo, celem zbadania różnych układów wielocząsteczkowych pod kątem ich właściwości mechanicznych. Fundamenty zastosowanych metod obliczeniowych, z powodzeniem wykorzystywanych przez innych badaczy w dziedzinie, leżą ściśle w zakresie działów mechaniki ośrodków ciągłych oraz mechaniki statystycznej.

Badane układy stanowią modele mikroskopowe hipotetycznych materiałów, a w ich analizie skupiono się w szczególności na współczynniku Poissona. Znaczna część pracy poświęcona została układom dwuwymiarowym, stworzonym z tzw. twardych heksamerów cyklicznych. Pojedyncza molekula tego typu składa się z sześciu twardych dysków rozmieszczonych w wierzchołkach sześciokąta foremnego. W pracy rozważane są różne kształty molekuł, odpowiadające różnym wartościom *parametru anizotropii*. Układy takich cząstek są interesujące z kilku powodów, z których przede wszystkim wymienić należy izotropowość wszystkich faz, w których istnieją (dla małych odkształceń ich właściwości nie zależą od kierunku) oraz to, że najgęstsza z nich jest chiralna i charakteryzuje się ujemną (anomalną) wartością współczynnika Poissona – jak zostało wykazane w tej pracy – dla dowolnego parametru anizotropii. Materiały tego typu nazywane są *auksetykami* i zachowują się w sposób sprzeczny z intuicją – przy rozciąganiu podłużnym powiększają (zamiast pomniejszać) swoje wymiary poprzeczne. Ze względu na rozmaite, potencjalne zastosowania inżyneryjno-techniczne, wynikające z wykorzystania tych nietypowych właściwości, są one obecnie intensywnie badane i rozwijane. W pracy przeanalizowano zarówno *czyste* układy twardych heksamerów cyklicznych (składające się wyłącznie z cząstek tego typu), jak i układy twardych dysków, do których heksamery wprowadzane były w formie równoległych warstw, modyfikujących współczynnik Poissona tworzonych struktur, uzyskując w ten sposób zarówno auksetyki, nieauksetyki, jak i częściowe auksetyki. Takie modyfikacje otwierają nową drogę do kontrolowanej zmiany właściwości sprężystych kryształów i – jak zostało to pokazane w pracy – mogą być zaimplementowane również w układach trójwymiarowych.

Oprócz materiałów o ujemnych współczynnikach Poissona, w pracy zawarto również rozdział poświęcony prostym, izotropowym modelom struktur dwuwymiarowych o możliwie dużych (również maksymalnych) jego wartościach. Autorowi udało się je zamodelować używając twardych dysków o dwóch, nieznacznie różniących się średnicach.

ABSTRACT

Within this doctoral dissertation, computer simulations using several variations of Monte Carlo method were performed, in order to examine various multi-particle systems in terms of their mechanical properties. The foundations of the computational methods used, successfully used by other researchers in the field, lie strictly within the areas of continuum mechanics and statistical mechanics.

Studied systems represent microscopic models of hypothetical materials and their analysis focuses, in particular, on the Poisson's ratio. A significant part of the work was devoted to two-dimensional systems, formed by hard cyclic hexamers. The single molecule of this type consists of six hard discs, which are centered on vertices of a regular hexagon. The paper considers molecules of various shapes, corresponding to different values of the *anisotropy parameter*. Systems of such particles are interesting for several reasons, for which, first of all, it is necessary to mention the isotropicity of all the phases, in which they do exist (for small deformations their properties do not depend on the direction) and that the densest of these phases is chiral and has a negative (anomalous) Poisson's ratio – as demonstrated in this work – for any anisotropy parameter. Materials of this type are called *auxetics* and behave in a manner contrary to intuition – stretched longitudinally, they increase (instead of reducing) their transverse dimensions. Due to various potential engineering and technical applications resulting from the use of these atypical properties, they are currently intensively studied and developed. The work analyzes both, *pure* systems of hard cyclic hexamers (consisting of particles of this type only) and systems of hard discs, into which hexamers were introduced in the form of parallel layers modifying the Poisson's ratio of the resulting structures, thus, obtaining auxetics, non-auxetics and also partial auxetics. Such modifications open up a new way to manipulate the elastic properties of crystals and – as shown in the work – can also be implemented in three-dimensional systems.

In addition to materials with negative Poisson's ratio, the work also contains a chapter on simple, isotropic models of two-dimensional structures with high (also maximum) values of this coefficient. The author managed to model them using hard discs with two slightly different diameters.