

Politechnika Łódzka
Katedra Fizyki Molekularnej
ul. Żeromskiego 116, 90 – 924 Łódź
www.p.lodz.pl/k-32

PoWieFoNa 2015

Szóste Warsztaty Nanotechnologiczne

Łódź

22-25 czerwca 2015

Pomorsko-Wielkopolskie Forum Nanotechnologiczne
www.po-wie-fo-na.pl

**Warsztaty organizowane przez:
Katedrę Fizyki Molekularnej
Politechniki Łódzkiej**

Warsztaty zostały zorganizowane pod patronatem
*Dziekana Wydziału Chemicznego
Politechniki Łódzkiej*

Organizatorzy dziękują za wsparcie finansowe
Dziekanowi Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej



Organizatorzy

Politechnika Łódzka

Politechnika Gdańska

Instytut Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu

Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny

Komitety Naukowy

J. Ulański (Łódź) - współprzewodniczący

K.W. Wojciechowski (Poznań) - współprzewodniczący

N. Guskos (Szczecin)

B. Maruszewski (Poznań)

P. Polanowski (Łódź)

M. Kozanecki (Łódź)

J. Jung (Łódź)

Komitety Organizacyjny

P. Polanowski (Łódź) - przewodniczący

J. Jung (Łódź)

M. Kozanecki (Łódź)

K. Krysiak (Łódź)

E. Krysiak (Łódź)

A. Stefaniuk-Grams (Łódź)

J. Rybicki (Gdańsk)

A. Rybicka (Gdańsk)

S. Winczewski (Gdańsk)

K.W. Wojciechowski (Poznań)

Komitety Programowy

M. Banaszak (Poznań) - przewodniczący

A. Guskos (Szczecin)

M. Kozanecki (Łódź)

P. Polanowski (Łódź)

J. Rybicki (Gdańsk)

A. Sikorski (Warszawa)

SPIS TREŚCI

Program Warsztatów	7
M. Banaszak	
Fizyka polimerów od Flory'ego do Pakuły	13
M. Dziecielski, M. Banaszak	
Nanostruktury jonowych kopolimerów wieloblokowych	14
P. Filipczak, M. Kozanecki	
Wpływ nanocząstek srebra na wibracyjne właściwości ciekłej wody.	15
I. Głowacki	
Wpływ obecności kompleksów irydu na pułapki i centra rekombinacji promienistej w PVK i mieszaninie PVK/PBD	16
E. B. Gotfryd	
Nanocząstki magnetyczne. Wybrane właściwości na przykładzie ferrytyny.	17
A. Guskos	
Pionierzy sztuki w przestrzeni wirtualnej Przykłady koncepcji artystycznych i projektowych związanych z pojawieniem się problematyki komputerowej przestrzeni wirtualnej ze szczególnym uwzględnieniem twórczości prof. Marcosa Novaka.	18
N. Guskos, J. Typek, G. Zolnierkiwicz, S. Glenis, A. Diamantopoulou, A. Guskos, P. Berczynski, D. Dolat, S. Mozia and A. Morawski	
Magnetyczne właściwości modyfikowanych N-TiO ₂ jonami z grupy żelaza.	19
P. Hibner, B. Łuszczynska, J. Ulański	
Organiczne ogniwa fotowoltaiczne oparte na P3HT-60PCBM- optymalizacja procesu wytwarzania urządzeń.	20
Ł. Janasz, I. Tsydel, W. Pisula, J. Ulański	
Organiczne tranzystory polowe z ultracienkimi warstwami poli(3-heksylofenu).	21

J. Jung, R. Kielbik, K. Halagan, P. Polanowski Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych - ARUZ.	22
A. Koper Mechanika statystyczna polimerów - aktualny stan badań	23
P. Knychała, M. Banaszak Samoorganizacja w skali nano asymetrycznych kopolimerów sulfonowanych badana metodą symulacji komputerowych	24
M. Kozanecki, K. Krysiak, K. Budzałek, E. Krysiak, B. M. Bekier Synteza termoczulych makrocząsteczek zawierających znaczniki fluorescencyjne jako elementów nanostruktur polimerowych	25
J. Krawczyk, B. Chakrabarti S. Groce, T. McLeish, T. Lindner Wpływ elastyczności macierzy polimerowych na segregację faz w mieszaninach polimerów.	26
E. Krysiak, A. Wypych-Puszkarz, K. Krysiak, J. Ulański SI-ARGET ATRP jako narzędzie do otrzymywania materiałów hybrydowych, do zastosowań w elektronice organicznej.	27
K. Krysiak, M. Borkowski, R. Lange, J. Rum, E. Krysiak, M. Kozanecki Zastosowanie metali jako reduktorów w generowaniu rodników w procesie ATRP.	28
M. Kucinska, B. Łuszczyńska, M. Wesoly, W. Wróblewski, J. Ulański Organiczne tranzystory z efektem polowym z modulacją ładunku czułe na jony azotanowe.	29
A. Łuczak, I. Tsydel, J. Jung, J. Ulański Wpływ wilgoci na parametry organicznych tranzystorów z efektem polowym	30
B. Łuszczyńska, Z. Sieradzki, G. Wiosna-Sałyga Polimerowe diody elektroluminescencyjne drukowane metodą ink-jet.	31
M. Marć, M.R. Dudek, J.J. Koziol, B. Zapotoczny Modyfikowane nanorurki tytanianowe do usuwania zanieczyszczeń chemicznych	32

B. T. Maruszewski, A. Drzewiecki, R. Starosta Efektywna liczba Poissona i moduł Younga w drganiach ciał termosprężystych	33
M. N. Olejniczak, K. Piechocki, J.S. Owczarek, M. Kozanecki Badanie procesu uwalniania substancji czynnej z termoczułych nośników hydrożelowych	34
P. Polanowski, J. Jung, K. Halagan Kilka uwag o pracy prof. Tadeusza Pakuły jako autora unikalnych algorytmów symulacyjnych. Algorytmy CMA i DLL – jak to działa?	35
P. Polanowski, A. Sikorski Zastosowanie algorytmu dynamicznej cieczy sieciowej w badaniu transportu cieczy w ośrodkach złożonych	36
J. Saramak, K. Halagan, M. Kozanecki, P. Polanowski Badanie dyfuzji wody z użyciem metody Monte-Carlo w dwuskładnikowych układach woda-polimer.	37
A. Sikorski, A. Kuriata, P. Polanowski Polimery cykliczne: struktura, dynamika, zastosowania. Stan badań i perspektywy	38
A. Stefaniuk-Grams, J. Jung, J. Ulański Fotogeneracja nośników ładunku i efekt fotowoltaiczny w układach P3HT:PCBM	39
I. Tszydel, M. Kucińska, T. Makowski, A. Nosal, M. Gazicki-Lipman, J. Ulański Wpływ rozpuszczalnika na morfologię oraz parametry pracy organicznych tranzystorów z efektem polowym	40
J. Ulański Kontrolowana krystalizacja półprzewodników organicznych w matrycach polimerowych	41
S. Winczewski, J. Dziedzic, J. Rybicki Algorytmy do śledzenia ruchu dyslokacji w symulacjach dynamiczno- molekularnych	42

<i>G. Wiosna-Sałyga, M. Góra, M. Zagórska, B. Łuszczyńska, I. Głowacki, J. Ulański, A. Proń</i>	
Fotofizyka oligotiofenowych pochodnych diketopirolopiroli i ich zastosowanie jako emiterów w diodach elektroluminescencyjnych	43
<i>E. Witkowska, G. Wiosna-Sałyga, B. Łuszczyńska, I. Głowacki, J. Ulański</i>	
Właściwości fotofizyczne nowych kompleksów metali	44
<i>K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov</i>	
Symulacje komputerowe stałych sprężystości za pomocą metody kolejnych minimalnych obrazów	45
<i>S. Wołoszczuk</i>	
Zachowanie fazowe stopów i roztworów niesymetrycznych kopolimerów trój blokowych	46

Program Warsztatów



Poniedziałek 22 czerwca 2015

- 15.00 - 17.30 rejestracja
- 18.00 - 18.10 otwarcie warsztatów
- 18.10 - 18.55 J. Ulański
Kontrolowana krystalizacja półprzewodników
organicznych w matrycach polimerowych
- 19.30 - kolacja

Wtorek 23 czerwca 2015

- 8.00 - 9.00 śniadanie

Sesje poświęcone Tadeuszowi Pakule

Sesja 1: Przewodniczący – Michał Banaszak

- 9.00 - 9.45 P. Polanowski, J. Jung, K. Hałagan
Kilka uwag o pracy prof. Tadeusza Pakuły jako autora
unikalnych algorytmów symulacyjnych. Algorytmy CMA
i DLL– jak to działa?
- 9.45 - 10.15 J. Jung, R. Kiełbik, K. Hałagan, P. Polanowski
Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych -ARUZ.
- 10.30 - 14.00 zwiedzanie łódzkiego Technoparku
- 14.00 - 15.00 przerwa obiadowa

Sesja 2: Przewodniczący - B. T. Maruszewski

- 15.00 - 15.45 M. Banaszak
Fizyka polimerów od Flory'ego do Pakuły.
- 15.45 - 16.15 P. Polanowski, A. Sikorski
Zastosowanie algorytmu dynamicznej cieczy sieciowej w
badaniu transportu cieczy w ośrodkach złożonych.
- 16.15 - 16.45 S. Wołoszczuk
Zachowanie fazowe stopów i roztworów
niesymetrycznych kopolimerów trój blokowych.
- 16.45 - 17.00 przerwa kawowa



Sesja 3: Przewodniczący – Andrzej Sikorski

- 17.00 - 17.30 P. Knychała, M. Banaszak
Samoorganizacja w skali nano asymetrycznych
kopolimerów sulfonowanych badana metodą symulacji
komputerowych.
- 17.30 - 18.00 M. Dzięcielski, M. Banaszak
Nanostruktury jonowych kopolimerów wieloblokowych.
- 19.00 - kolacja

Środa 24 czerwca 2015

- 8.00 - 9.00 śniadanie

Sesja 4: Przewodniczący – Nikos Guskos

- 9.00 - 9.45 K. W. Wojciechowski, K. V. Tretiakov
Symulacje komputerowe stałych sprężystości za pomocą
metody kolejnych minimalnych obrazów.
- 9.45 - 10.30 B. T. Maruszewski, A. Drzewiecki, R. Starosta
Efektywna liczba Poissona i moduł Younga w drganiach
ciał termosprężystych.
- 10.30 - 11.00 A. Sikorski, A. Kuriata, P. Polanowski
Polimery cykliczne: struktura, dynamika, zastosowania.
Stan badań i perspektywy.
- 10.45 - 11.00 przerwa kawowa

Sesja 5: Przewodniczący – Jarosław Jung

- 11.00 - 11.30 I. Głowacki
Wpływ obecności kompleksów irydu na pułapki i centra
rekombinacji promienistej w PVK i mieszaninie
PVK/PBD.
- 11.30 - 12.00 B. Łuszczynska, Z. Sieradzki, G. Wiosna-Sałyga
Polimerowe diody elektroluminescencyjne drukowane
metodą ink-jet.



12.00 - 12.30 M. Kozanecki, K. Krysiak, K. Budzałek, E. Krysiak,
B. M. Bekier
Synteza termoczulych makrocząsteczek zawierających
znaczniki fluorescencyjne jako elementów nanostruktur
polimerowych.

13.00 - 14.00 przerwa obiadowa

Sesja 6: Przewodniczący – Krzysztof Wojciechowski

14.00 - 14.30 N. Guskos, J. Typek, G. Zolnierkiwicz, S. Glenis,
A. Diamantopoulou, A. Guskos, P. Berczynski, D. Dolat,
S. Mozia, A. Morawski
Magnetyczne właściwości modyfikowanych N-TiO₂
jonami z grupy żelaza.

14.30 - 15.00 S. Winczewski, J. Dziedzic, J. Rybicki
Algorytmy do śledzenia ruchu dyslokacji w symulacjach
dynamiczno-molekularnych.

15.00 - 15.30 E. B. Gotfryd
Nanocząstki magnetyczne. Wybrane właściwości na
przykładzie ferrytyny.

15.30 - 15.45 przerwa kawowa

Sesja 7: Przewodniczący – Piotr Polanowski

15.45 - 16.15 M. Marć, M.R. Dudek, J.J. Koziół, B. Zapotoczny
Modyfikowane nanorurki tytanianowe do usuwania
zanieczyszczeń chemicznych.

16.15 - 16.45 A. Koper
Mechanika statystyczna polimerów - aktualny stan badań.

16.15 - 16.45 A. Guskos
Pionierzy sztuki w przestrzeni wirtualnej Przykłady
konceptji artystycznych i projektowych związanych
z pojawieniem się problematyki komputerowej przestrzeni
wirtualnej ze szczególnym uwzględnieniem twórczości
prof. Marcosa Novaka.

18.00 - kolacja



Czwartek 25 czerwca 2015

8.00 - 9.00 śniadanie

Sesja 8: Przewodniczący – Marcin Kozanecki

- 9.00 - 9.30 P. Filipczak, M. Kozanecki
Wpływ nanocząstek srebra na wibracyjne właściwości ciekłej wody.
- 9.30 - 10.00 P. Hibner, B. Łuszczynska, J. Ulański
Organiczne ogniwa fotowoltaiczne oparte na P3HT-60PCBM - optymalizacja procesu wytwarzania urządzeń.
- 10.00 - 10.30 J. Krawczyk, B. Chakrabarti, S. Groce, T. McLeish, T. Lindner
Wpływ elastyczności macierzy polimerowych na segregację faz w mieszaninach polimerów.
- 10.30 - 11.00 E. Krysiak, A. Wypych-Puszkarczyk, K. Krysiak, J. Ulański
SI-ARGET ATRP jako narzędzie do otrzymywania materiałów hybrydowych, do zastosowań w elektronice organicznej.
- 11.00 - 11.15 Przerwa kawowa

Sesja 9: Przewodniczący – Andrzej Sikorski

- 11.15 - 11.45 E. Witkowska, G. Wiosna-Sałyga, B. Łuszczynska, I. Głowacki, J. Ulański
Właściwości fotofizyczne nowych kompleksów metali.
- 11.45 - 12.15 K. Krysiak, M. Borkowski, R. Lange, J. Rum, E. Krysiak, M. Kozanecki
Zastosowanie metali jako reduktorów w generowaniu rodników w procesie ATRP.
- 12.15 - 12.45 A. Łuczak, I. Tsydel, J. Jung, J. Ulański
Wpływ wilgoci na parametry organicznych tranzystorów z efektem polowym.



12.45 - 13.15 Ł. Janasz, I. Tszedel, W. Pisula, J. Ulański
Organiczne tranzystory polowe z ultracienkimi warstwami
poli(3 heksylofenu)

13.15 - 14.15 przerwa obiadowa

Sesja 10: Przewodniczący – Piotr Polanowski

14.15 - 14.45 M. N. Olejniczak, K. Piechocki, J.S. Owczarek,
M.Kozanecki

Badanie procesu uwalniania substancji czynnej
z termoczułych nośników hydrożelowych.

14.45 - 15.15 J. Saramak, K. Hałagan, M. Kozanecki, P. Polanowski
Badanie dyfuzji wody z użyciem metody Monte-Carlo
w dwuskładnikowych układach woda-polimer.

15.15 - 15.45 A. Stefaniuk-Grams, J. Jung, J. Ulański
Fotogeneracja nośników ładunku i efekt fotowoltaiczny
w układach P3HT:PCBM.

15.45 - 16.15 Przerwa kawowa

Sesja 11: Przewodniczący – Jarosław Jung

16.15 - 16.45 I. Tszedel, M. Kucińska, T. Makowski, A. Nosal,
M. Gazicki Lipman, J. Ulański
Wpływ rozpuszczalnika na morfologię oraz parametry
pracy organicznych tranzystorów z efektem polowym.

16.45 - 17.15 G. Wiosna-Sałyga, M. Góra, M. Zagórska,
B. Łuszczyńska, I. Głowacki, J. Ulański, A. Proń
Fotofizyka oligotiofenowych pochodnych
diketopirolopiroli i ich zastosowanie jako emiterów w
diodach elektroluminescencyjnych

17.00 - 17.30 M. Kucinska, B. Łuszczyńska, M. Wesoły,
W. Wróblewski, J. Ulański
Organiczne tranzystory z efektem polowym z modulacją
ładunku czułe na jony azotanowe.



PoWieFoNa

Szóste Warsztaty Nanotechnologiczne
22-25 czerwca 2015, Łódź





Fizyka polimerów od Flory'ego do Pakuły

Michał Banaszak

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu

Przedstawiony zostanie zarys rozwoju fizyki polimerów opartej na wybranych modelach sieciowych, ze szczególnym uwzględnieniem algorytmu ruchów kooperatywnych Profesora Tadeusza Pakuły. Pokazane zostaną wybrane wyniki symulacji komputerowych, w których stosowany jest ten algorytm.

W drugiej części wykładu zostanie przypomniany przełomowy artykuł dotyczący teorii pola polimerów, który 50 lat temu został opublikowany przez Sir Sama Edwardsa. W wykładzie zostanie krótko omówiona historia teorii pola polimerów. Wykład będzie ilustrowany licznymi przykładami, również odnoszącymi się do nanotechnologii.



Nanostruktury jonowych kopolimerów wieloblokowych

Michał Dzięcielski, Michał Banaszak

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu

Kopolimery blokowe wykazują zdolność do samoorganizacji w przestrzennie uporządkowane i termodynamicznie stabilne nanostruktury [1]. Mogą tworzyć warstwy, cylindry, sfery lub struktury dwuciągłe zwane żyroidami [2]. Parametry, przy których powstają poszczególne nanostruktury, można odczytać z diagramu fazowego, pokazującego warunki przejścia między kolejnymi strukturami oraz między fazami uporządkowanymi i nieuporządkowanymi [3,4]. Diagramy fazowe neutralnych kopolimerów są już dobrze. Jednak dodanie ładunków do takich układów powoduje duże problemy w przewidywaniu wyglądu powstających nanostruktur. Zachowanie kopolimerów jonowych znacząco odbiega od zachowania kopolimerów neutralnych [5]. Podczas prezentacji przedstawione zostaną diagramy fazowe kopolimerów jonowych uzyskane z symulacji metodą dynamiki molekularnej i obliczeń teorii pola samozgodnego.

Podziękowania

Projekt został sfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki przyznanych na podstawie decyzji numer DEC-2012/07/N/ST4/00293.

Literatura

- [1] M. W. Matsen, M. Schick, *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **72**, 2660.
- [2] E. W. Cochran, C. J. Garcia-Cervera, G. H. Fredrickson, *Macromolecules* 2006, **39**, 2449.
- [3] M. Banaszak, M. D. Whitmore, *Macromolecules*, 1992, **25**, 3406.
- [4] J. D. Vavasour, M. D. Whitmore, *Macromolecules*, 1992, **25**, 5477.
- [5] P. Knychala, M. Dzięcielski, M. Banaszak, N. P. Balsara, *Macromolecules*, 2013, **46**, 5724.



Wpływ nanocząstek srebra na vibracyjne właściwości ciekłej wody

Paulina Filipczak, Marcin Kozanecki

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

Zjawisko rezonansu ramanowskiego polega na silnym wzmocnieniu sygnału ramanowskiego danej próbki i silnie zależy od długości fali wiązki wzbudzającej. Pastorczak *et al.* zaobserwował zjawisko rezonansu w ciekłej wodzie [1]. Polaryzacyjne widma Ramana pokazują, że stosunek intensywności pasm odpowiadających symetrycznym i asymetrycznym drganiom rozciągającym wody: 3200 i 3400 cm^{-1} przypisanym odpowiednio: „silnym“ i „słabym“ wiązaniom wodorowym jest zależny od długości fali wiązki wzbudzającej. Stosunek ten, uważany jest za miarę mikrostruktury wody. Stąd hipoteza, że efekt rezonansu ramanowskiego silnie zależy od supramolekularnej struktury wody. W prowadzonych badaniach analizowany jest wpływ nanocząstek srebra (AgNPs) otrzymanych na drodze redukcji chemicznej [2] na efekt rezonansu wody. W prezentacji zostanie omówiony wpływ rozmiaru AgNPs oraz temperatury na zjawisko rezonansu. Ze względu na warunki prowadzonych badań, niezwykle ważnym aspektem jest stabilność badanych nanocząstek. Analiza widm absorpcyjnych dyspersji AgNPs pozwoliła oszacować stabilność badanych układów w warunkach podwyższonej temperatury oraz ekspozycji na promieniowanie lasera.

Podziękowania

Praca częściowo finansowana przez grant nr 013/09/B/ST4/03010.

Literatura

- [1] M. Pastorczak *et al.*, *J. Phys. Chem. A*, 2008, **112**, **43**, 10705-10707.
- [2] A. J. Frank *et al.*, *J. Chem. Educ.*, 2010, **87**, 1098 - 1101.



Wpływ obecności kompleksów irydu na pułapki i centra rekombinacji promienistej w PVK i mieszaninie PVK/PBD

Ireneusz Głowacki

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

W pracy dokonano analizy wyników niskotemperaturowej termoluminescencji (TL) dla poli(*N*-winylokarbazolu) PVK i mieszaniny PVK z 40 % wag. pochodnej oksadiazolu (PBD) domieszkowanych kompleksami irydu: tris(2-fenylopirydyna) irydu (Ir(ppy)_3) lub bis[2-(2'-benzotioło)pirydynoN,C^{3'}] (acetylo-acetonian) irydu ($(\text{btp})_2\text{Iracac}$).

Na podstawie widm TL stwierdzono, że cząsteczki obydwu kompleksów irydu tworzą nowe miejsca pułapkowe w obydwu matrycach. Pułapki zlokalizowane na molekułach Ir(ppy)_3 mają głębokość około 0.4 eV i dominują w matrycy PVK. Znacznie mniejszy ich udział występuje w matrycy PVK/PBD, w której dominującą populację stanowią płytsze pułapki zlokalizowane na cząsteczkach matrycy. Zaobserwowano, że obecność cząsteczek Ir(ppy)_3 powoduje przesunięcie, w stronę wyższych temperatur, maksimum TL związanego z uwalnianiem nośników z pułapek zlokalizowanych na matrycy. Jest to wynikiem oddziaływania zapuławpkowanych nośników z cząsteczkami kompleksów irydu o dużym momencie dipolowym.

Ponadto z eksperymentów spektralnie rozdzielczej TL wynika, że cząsteczki kompleksów irydu stanowią efektywne centra rekombinacji promienistej. Dla stężenia 1% wag. molekuły kompleksów irydu efektywnie konkurują z centrami rekombinacji promienistej obecnymi w PVK i mieszaninie PVK/PBD [1].

Literatura

[1] I. Głowacki and Z. Szamel, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2010, **43**, 295101-9 .



Nanocząstki magnetyczne. Wybrane właściwości na przykładzie ferrytyny

Elżbieta B. Gotfryd

Wydział Fizyki, Matematyki i Informatyki, Politechnika Krakowska

Celem wystąpienia jest zaprezentowanie wybranych właściwości magnetycznych nanocząstek oraz przedstawienie wyników badań przeprowadzonych w Zakładzie Badań Magnetycznych Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk w Krakowie. Badania zostały przeprowadzone dzięki uprzejmości Pani Profesor Marii Bałandy dla próbek ferrytyny pochodzenia końskiego (tzw. horse-spleen ferritin – HoSF) przy pomocy magnetometru MSMP SQUID.

HoSF to białko charakteryzujące się właściwościami, takimi jak superparamagnetyzm [1], odpowiedzialne w organizmie za magazynowanie i transport żelaza. Jako nanocząstka HoSF jest bardziej „ekonomiczna” od wyżej wymiarowych cząstek, gdyż potrzebuje mniejszej ilości energii do pokonania bariery energetycznej czy też odwrócenia spinu. Dzięki dwufazowemu, żelazowemu rdzeniowi (wysoko krystaliczny rdzeń z nieuporządkowaną warstwą powierzchniową) wykazuje ona frustrację spinową, która destabilizuje prosty kolinearny model Stonera-Wohlfartha [2].

Podczas prezentacji zostaną przedstawione wyniki badań podatności zmiennoprądowej AC oraz stałoprądowej DC oraz rezultat zastosowania dynamicznego rozpraszania światła (DSL – Dynamic Light Scattering), które to pozwoliło na wyznaczenie rozmiaru cząstek. Dane te pozwalają na wyznaczenie wartości relaksacji spinowej oraz temperatury blokowania, w której to wektor magnetyzacji pozostaje zablokowany w minimum energetycznym.

Literatura:

- [1] S. H. Kilcoyne, R. Cywinski, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2009, 140-144
- [2] U. Vodkoboynik, *Acta Phys.* 1997, **S-43**, Pol. A



**Pionierzy sztuki w przestrzeni wirtualnej
Przykłady koncepcji artystycznych i projektowych
związanych z pojawieniem się problematyki
komputerowej przestrzeni wirtualnej ze
szczególnym uwzględnieniem twórczości prof.
Marcosa Novaka.**

Andreas Guskos

Wydział Sztuk Wizualnych, Akademia Sztuki w Szczecinie

Wraz z powstaniem komputerów i koniecznością cyfrowego zapisu danych pojawiła się potrzeba wytworzenia interfejsów człowiek-komputer pozwalających na przetwarzanie informacji w sposób optymalny dla specyfiki ludzkiej percepcji. Pojawiły się nowe media cyfrowe, które zostały włączone również w zasób narzędzi do tworzenia sztuki. Początkowo ograniczona dostępność tego typu technologii pozwalała na eksperymentowanie z nowymi mediami jedynie wąskiemu gronu specjalistów niejako przy okazji właściwej działalności zawodowej.

Współcześnie technologie komputerowe są dostępne szerokiemu gronu odbiorców. Nadal jednak charakterystyką twórców poruszających się w nowych mediach jest przemieszczanie się pomiędzy dyscyplinami, na pograniczu nauki, sztuki i technologii. Przedmiotem prezentacji jest ukazanie zarysu charakterystycznych zjawisk i twórczości związanych z powstaniem i rozwojem komputerowej przestrzeni informacji od czasu budowy pierwszych komputerów po dzień dzisiejszy, ze szczególnym uwzględnieniem działalności prof. Marcosa Novaka.



Magnetyczne właściwości modyfikowanych N-TiO₂ jonami z grupy żelaza

N. Guskos¹, J. Typek¹, G. Zolnierkiwicz¹, S. Glenis²,
A. Diamantopoulou², A. Guskos¹, P. Berczynski¹,
D. Dolat³, S. Mozia³, A. Morawski³

¹*Instytut Fizyki, Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny*

²*Instytut Chemii i Ochrona Środowiska, Zachodniopomorski Uniwersytet
Technologiczny*

³*Instytut Fizyki Ciała Stałego, Uniwersytet Ateński*

Pomiary dynamiczne i statyczne właściwości magnetycznych nanokompozytów modyfikowanych ditlenków tytanu (M, N-TiO₂ M=Fe(III) i Ni(II)) jonami z grupy żelaza wykazały na współlistnienie wielu oddziaływań magnetycznych dążących do uporządkowań ferromagnetycznych i antyferromagnetycznych. Występuje stan superparamagnetyczny i w niektórych nanokompozytach mamy procesy metamagnetyczne. Procesy metamagnetyczne silnie zależą od temperatury i przyłożonego pola magnetycznego. We wszystkich badanych nanokompozytach występuje histereza w niskich jak i wysokich temperaturach (temperatura pokojowa).



Organiczne ogniwa fotowoltaiczne oparte na P3HT-60PCBM-optymalizacja procesu wytwarzania urządzeń

Paulina Hibner, Beata Łuszczynska, Jacek Ulański

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

Organiczne ogniwa słoneczne są rozważane jako alternatywne źródła energii głównie ze względu na niski koszt produkcji, elastyczność i wzrastającą sprawność konwersji światła na prąd elektryczny. O wydajności takich ogniw decyduje wiele czynników związanych z techniką ich wytwarzania, takich jak: masa cząsteczkowa materiałów polimerowych użytych do ich wytworzenia, rodzaj rozpuszczalnika, sposób i temperatura wygrzewania warstw po ich naniesieniu na podłoże. Czynniki te bezpośrednio wpływają na morfologię heterozłącza, co ma odzwierciedlenie w parametrach pracy ogniw fotowoltaicznych.

Laboratoryjne prace badawcze obejmowały wytworzenie cienkowarstwowych ogniw słonecznych na bazie mieszaniny Poli (3-heksylotiofenu) (P3HT) i estru metylowego [6,6]-fenylo-C61-kwasu masłowego (PCBM C60). Skupiono się również na scharakteryzowaniu ogniw i porównaniu ich procesu wytwarzania w różnych warunkach.

Literatura:

[1] Burak Y. Kadem, Mohammed K. Al-haskimi, A. K. Hassan, *Energy Procedia*, 2014, **50**, 237-245



Organiczne tranzystory polowe z ultracienkimi warstwami poli(3 heksylotiofenu)

Łukasz Janasz ¹, Izabela Tszudel ¹, Wojciech Pisula ², Jacek Ulański ¹

¹ Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

² Max Planck Institute for Polymer Research, Mainz

Streszczenie

Elektronika organiczna jest obecnie prężnie rozwijającą się dziedziną, stwarzającą nowe perspektywy zarówno w nauce i przemyśle [1]. Na szczególną uwagę zasługują skoniugowane polimery stosowane w elastycznych urządzeniach wielkoformatowych przy relatywnie niskim koszcie produkcji [2].

Wytworzono serie tranzystorów organicznych z efektem polowym z ultracienkimi warstwami poli(3-heksylotiofenu) (P3HT) [3]. Wyznaczono parametry elektryczne tranzystorów z warstwami P3HT o grubościach w zakresie od około 2nm do około 10nm, w których ruchliwość nośników ładunku wynosiła, odpowiednio, od 0,001 cm²/Vs do 0,02 cm²/Vs. Zaobserwowano, również, że ruchliwość nośników ładunku zależy od długości łańcucha polimerowego P3HT.

Zauważono, że pre-agregacja P3HT w roztworze wpływa na morfologię warstw, właściwości elektryczne tranzystorów i powoduje zwiększenie ruchliwości nośników ładunku do 0,1 cm²/Vs.

Podziękowania

Badania były częściowo finansowane przez Narodowe Centrum Nauki (grant nr UMO- 2013| 08|M| st5|00914).

Literatura

- [1] S. Holliday et.al., *Chem. Mater.*, 2014, **26**, 647–663.
- [2] C. Sekine et.al., *Adv. Mater.*, 2014, **15**, 034203.
- [3] H. Tsao, K. Muellen, *Chem. Soc. Rev.*, 2010, **39**, 2372-2386 .



Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych ARUZ

Jarosław Jung¹, Rafał Kielbik², Krzysztof Hałagan¹, Piotr Polanowski¹

¹*Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka*

²*Katedra Mikroelektroniki i Technik Informatycznych, Politechnika Łódzka*

W prezentacji omówiona zostanie maszyna o nazwie Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych (ARUZ). Konstrukcja tego urządzenia, w początkowej fazie projektowania, dedykowana była algorytmowi dynamicznej cieczy sieciowej (w j. ang. *Dynamic Lattice Liquid* - DLL). W obecnej postaci stanowi rodzaj automatu komórkowego, który zawiera bardzo dużą ilość, bo około 2700, programowalnych układów FPGA (w j. ang. *Field Programmable Gate Array*). Układy te umieszczone są w węzłach kubicznej sieci przestrzennej. Każdy układ FPGA połączony jest bezpośrednio z 6 sąsiednimi oraz z centralną jednostką sterującą. Taka konstrukcja umożliwia pracę równoległą, czyli przetwarzanie danych przez wszystkie układy jednocześnie. Dzięki rekonfigurowalności układów FPGA, ARUZ jest maszyną uniwersalną. Można ją będzie użyć do analizy zjawisk zachodzących w złożonych, wieloskładnikowych układach z zastosowaniem różnych metod symulacyjnych.



Samoorganizacja w skali nano asymetrycznych kopolimerów sulfonowanych badana metodą symulacji komputerowych

Piotr Knychala¹, Michał Banaszak²

¹ *Państwowa Wyższa Szkoła Zawodowa im. Prezydenta Stanisława
Wojciechowskiego w Kaliszu*

² *Wydział Fizyki, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu*

Przedstawiono wyniki sieciowych symulacji Monte-Carlo z wykorzystaniem algorytmu ruchów kooperatywnych (ang. Cooperative Morion Algorithm, CMA) oraz metody wymiany replik (ang. parallel tempering) asymetrycznego kopolimeru dwublokowego A/S-B o różnych poziomach sulfonowania. Zastosowano prosty model w którym oddziaływania ograniczono do odległości równej stałej sieciowej [1]. Kopolimer tego typu był wcześniej wykorzystany do badania procesu samoorganizacji kopolimeru polistyren sulfonowany – polimetylobuten (PSS-b-PMB), którego zachowanie fazowe okazało się odmienne [1-2] od tego obserwowanego dla klasycznych kopolimerów dwublokowych A-B.

Podziękowania

Badania wykonane w ramach grantu DEC-2012/07/N/ST4/00293 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki. Obliczenia wykonano w Poznańskim Centrum Superkomputerowo Sieciowym.

Literatura

- [1] P. Knychala, M. Dziecielski, M. Banaszak, N. Balsara, *Macromolecules*, 2013, **46** (14), 5724–5730,
- [2] P. Knychala, M. Banaszak, N. Balsara, *Macromolecules*, **47** (7), 2529–2535, 20



Mechanika statystyczna polimerów - aktualny stan badań

Andrzej Koper

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu

W pracy omówiono w zuniifikowany sposób własności szeregu modeli losowych polimerów, w szczególności ich skalowanie, związek z konforemną teorią pola, modelami macierzowymi i ewolucją Schramma-Loewnera. Omówiono również perspektywy ich opisu w ramach teorii całkowania funkcjonalnego w wersji Hida-Albeveiro-Streita opartej na analizie stochastycznej białego szumu.



Synteza termoczulych makrocząsteczek zawierających znaczniki fluorescencyjne jako elementów nanostruktur polimerowych

Marcin Kozanecki¹, Kamil Krysiak¹, Katarzyna Budzałek¹, Ewa Krysiak¹, Bartłomiej M. Bekier²

¹*Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka,*

²*Publiczne Liceum Ogólnokształcące Politechniki Łódzkiej*

Nanostruktury polimerowe są obecnie jedną z najintensywniej badanych grup materiałów funkcjonalnych. Możliwość ich syntezy na drodze kontrolowanej polimeryzacji pozwala na tworzenie układów o ściśle zaplanowanej architekturze i funkcjonalności [1,2].

W niniejszej pracy zaprezentowane zostaną różne strategie syntezy termoczulych polimerów zawierających marker fluorescencyjny (rodamina, fluoresceina) w różnych pozycjach (w środku łańcucha lub na jego końcach) z wykorzystaniem nowoczesnych metod syntezy: polimeryzacji rodnikowej z przeniesieniem atomu i reakcji typu „Click”. Dodatkowo wybrane układy scharakteryzowane zostały pod względem ich właściwości optycznych.

Literatura

[1]. J-F. Lutz, *Adv. Mater.* 2011, **23**, 2237-2243.

[2]. K. Matyjaszewski, N. V. Tsarevsky, *Nature Chem.* 2009, **1**(4), 276–288



Wpływ elastyczności macierzy polimerowych na segregację faz w mieszaninach polimerów

J. Krawczyk¹, B. Chakrabarti², S. Groce², T. McLeish³, T. Lindner⁴

¹ Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

² Department of Mathematical Sciences, Durham University

³ Department of Physics, Durham University, Durham UK

⁴ Research and Development Department, Procter & Gamble Service GmbH,
Schwalbach am Taunus, DE

Segregacja faz w mieszaninach polimerowych jest zjawiskiem znanym i badanym od dłuższego czasu. Teoria Flory'ego Huggins'a [1,2] bardzo dobrze je opisuje pozwalając na dobre jakościowe zrozumienie tego zjawiska. Głównymi czynnikami powodującymi segregację są różnice w entalpii poszczególnych składników.

Niemniej jednak czynniki entropiczne (powodowane różnicami w długość elementów ulegających segregacji, czy ich topologią – łańcuchy, dendrymery, gwiazdy [3]) przy jednakowych stałych oddziaływania zaczynają być znaczące. Duży wpływ na segregację mają także efekty powierzchni. Jednym z elementów wpływających na segregację faz, który nie doczekał się jeszcze wnikliwej analizy jest elastyczność macierzy polimerowej. W niniejszym referacie przedstawiam wstępne wyniki analizy wpływu elastyczności na separację faz. Używając teorii Flory'ego-Huggins'a rozszerzonej o przybliżenie kwadratowego gradientu[4,5], pokazuję jak sztywność materiału zmienia zdolność mieszaniny do separacji.

Literatura

- [1] M. Huggins, *J. Chem. Phys* 9 330 (1941)
- [2] P. Flory, *J. Chem. Phys* 9 660 (1941)
- [3] J. Lee, N. Lee and S. Peri et al. *Physical Review Letters*, 2014, **113** 225702
- [4] J. Cahn, *J. Chem. Phys.* 1977, **66**, 3667
- [5] I. Schmidt, K. Binder, *J. Physique*, 1985, **46**, 1631



SI-ARGET ATRP jako narzędzie do otrzymywania materiałów hybrydowych, do zastosowań w elektronice organicznej

Ewa Krysiak, Aleksandra Wypych-Puszkarcz, Kamil Krysiak,
Jacek Ulański

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

W ostatnich latach organiczno-nieorganiczne materiały hybrydowe zyskują na popularności w wielu gałęziach przemysłu [1]. Obecnie nowoczesny przemysł elektroniczny i elektryczny wykorzystuje wiele rodzajów nanomateriałów, np. nanodielektryków. Materiały tego typu charakteryzują się wysoką wartością przenikalności dielektrycznej, a także niskimi stratami. Znajdują one zastosowanie jako wypełnienia do kondensatorów, rezonatory dielektryczne etc. Obecnie poszukuje się rozwiązania problemów z przetwarzalnością poprzez użycie nanostruktur typu rdzeń-otoczka do wytwarzania kompozytów. W naszych badaniach zastosowano jedną z metod kontrolowanej polimeryzacji rodnikowej od powierzchni do otrzymania struktur rdzeń-otoczka a także warstw dielektryków szczepionych od powierzchni warstw krzemowych. Takie rozwiązania z powodzeniem mogą znaleźć zastosowanie jako cienkie warstwy dielektryków do zastosowań w organicznych tranzystorach z efektem polowym (OFET).

Podziękowania

Badania te były wspierane przez *Narodowe Centrum Nauki (NCN)* grant No DEC-2011/03/D/ST5/06074 i wykonywane w ramach substydium profesorskiego „Mistrz” *Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (FNP)* (9./2013).

Literatura

[1] S. Mann, *Biomimetic Materials Chemistry*, Wiley-VCH, 1997 Weinheim



Zastosowanie metali jako reduktorów w generowaniu rodników w procesie ATRP

Kamil Krysiak, Michał Borkowski, Rafał Lange, Jędrzej Rum,
Ewa Krysiak, Marcin Kozanecki

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

Jedną z najszerzej stosowanych metod polimeryzacji rodnikowej z odwracalną deaktywacją jest polimeryzacja rodnikowa z przeniesieniem atomu (ang. *ATRP* – *Atom Transfer Radical Polymerization*), która pozwala otrzymywać m.in. polimery liniowe, rozgałęzione, żele, szczotki i gwiazdy, hybrydy nieorganiczno-polimerowe [1, 2]. Obecnie stosowanych jest kilka sposobów inicjacji rodników w procesie ATRP [3,4,5].

W niniejszym wystąpieniu przedstawiony zostanie mechanizm oraz kinetyka generowania rodnika w procesie ATRP z zastosowaniem metali na „0” stopniu utlenienia. Jest to alternatywna metoda dla procesów z zastosowaniem nieorganicznych reduktorów [6] z możliwością znacznej redukcji ilości stosowanego reduktora w celu obniżenia kosztów oraz sterowania szybkością procesu ATRP.

Podziękowania

Badania zostały dofinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach

Literatura

- [1] J-S. Wang and K. Matyjaszewski, *J. Am Chem Soc*, 1995, **117**(20), 5614-5615.
- [2] K. Matyjaszewski and N. V. Tsarevsky, *J. Am Chem Soc* 2014.
- [3] W. Jakubowski, K. Min, and K. Matyjaszewski. *Macromolecules* 2005, **39**(1), 39-45.
- [4] D. Konkolewicz, K. Schroder, J. Buback, S. Bernhard, and K. Matyjaszewski, *ACS Macro Lett.* 2012, **1**(10), 1219-1223.
- [5] A. J. Magenau, N. C. Strandwitz, A. Gennaro, and K. Matyjaszewski, *Science* 2011, **332**(6025), 81-84.
- [6] Y. Wang and K. Matyjaszewski, *Polym. Prepr.* 2011, **52**(2), 542-543.



Organiczne tranzystory z efektem polowym z modulacją ładunku czułe na jony azotanowe

M. Kucinska¹, B. Łuszczyńska¹, M. Wesoły², W. Wróblewski²,
J. Ulański¹

¹ Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

² Zakład Mikrobioanalitiky, Politechnika Warszawska
magdalena.kucinska@edu.p.lodz.pl

Rozwój badań nad organicznymi tranzystorami z efektem polowym w ostatnich latach osiągnął poziom umożliwiający praktyczne zastosowania tych urządzeń [1]. Jedną z możliwości jest wytworzenie sensorów wykorzystujących organiczne tranzystory z efektem polowym, które mogą być stosowane w monitorowaniu zanieczyszczeń środowiska naturalnego, przemyśle spożywczym oraz medycynie [2].

W niniejszej pracy przedstawione zostaną sensory oparte na zmodyfikowanej konstrukcji organicznego tranzystora z efektem polowym z modulacją ładunku, czułe na stężenie jonów azotanowych w roztworze wodnym KNO_3 . Czułość urządzenia została osiągnięta dzięki umieszczeniu na obszarze pływającej bramki membrany jonoselektywnej z matrycą poliuretanową wychwytyjącej jony NO_3^- . Wykazano, że wraz ze wzrostem stężenia jonów azotanowych w roztworze wzrastał prąd płynący pomiędzy źródłem i drenem w tranzystorze organicznym.

Podziękowania

Projekt został sfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki przyznanych na podstawie decyzji numer DEC-2011/03/N/ST5/04476.

Literatura

- [1] H. Klauk, *Chem. Soc. Rev.*, 2010, **39**, 2643–2666.
- [2] L. Kergoat, B. Piro, M. Berggren et al., *Anal. Biol. Chem.*, 2012, **402**, 1813–1826



Wpływ wilgoci na parametry elektryczne organicznych tranzystorów z efektem polowym

Adam Łuczak, Izabela Tszudel, Jarosław Jung i Jacek Ulański

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

W ostatnich latach obserwuje się dynamiczny wzrost zainteresowania elastyczną elektroniką wielko-powierzchniową, w której kluczową rolę odgrywają organiczne tranzystory z efektem polowym (w j. ang. Organic Thin Film Transistors - OFET). Tranzystory te wciąż nie są powszechnie stosowane, ponieważ nie wykazują zadowalającej długoczasowej stabilności parametrów elektrycznych [1].

Prezentowane wyniki badań dotyczą wpływu wilgoci na działanie OFET, w których warstwę półprzewodnika stanowiła poli(triaryloamina) (PTAA) [2]. Przeprowadzone zostały pomiary serii charakterystyk prądowo-napięciowych wykonane podczas długoczasowej polaryzacji tranzystorów w warunkach atmosferycznych. Tranzystory, w których zastosowano warstwę Parylenu C, pełniącą jednocześnie warstwę ochronną dla półprzewodnika, zaobserwowano bardzo powolne zmiany napięcia progowego wywołane wilgocią. W tranzystorach OFET z izolatorem z ditlenku krzemu, gdzie warstwa półprzewodnika poddana była działaniu wilgoci, zaobserwowano silną korelację pomiędzy poziomem wilgoci w powietrzu a jego parametrami takimi jak napięcie progowe, czy ruchliwość nośników ładunku.

Podziękowania

Badania były częściowo finansowane przez Narodowe Centrum Nauki (Grant 2012/07/B/ST8/03789)

Literatura

- [1] A. Sharma, *Appl. Phys. Lett.*, 2009, **95**, 253305;
- [2] G. J. Mathijssen, *Adv. Mater.*, 2008, **20**, 975–979



Polimerowe diody elektroluminescencyjne drukowane metodą ink-jet

Beata Łuszczynska¹, Zbigniew Sieradzki², Gabriela Wiosna-Sałyga¹

¹ *Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka*

² *Towarzystwo Elektrotechnologiczne „QWERTY” Sp. z o.o.*

W skali laboratoryjnej warstwy aktywne polimerowych diody elektroluminescencyjnych są zazwyczaj wytwarzane metodą wylewania z roztworu na wirujące podłoże (z ang. spin-coating), natomiast elektrody nanoszone są metodą próżniowego naparowywania. W ramach prezentowanych badań podjęto próbę zaadaptowania metody druku: ink-jet do wytwarzania zarówno warstw aktywnych emitujących światło jak i nanoszenia elektrod. Druk diod elektroluminescencyjnych na bazie polimeru PDY-132 (Merck) był prowadzony we współpracy z firmą „QWERTY” za pomocą odpowiednio przygotowanej do tego celu drukarki przemysłowej dostępnej w laboratorium firmy. Istotnym problemem do pokonania było opracowanie atramentów drukarskich, na bazie materiału elektroluminescencyjnego, nieniszczącego głowicy drukarki oraz opracowanie warunków druku warstw dobrej jakości o grubości nieprzekraczającej 100 nm. Napięcia włącz drukowanych diod elektroluminescencyjnych były w zakresie od 2,5 do 3 V. Maksymalna luminancja diod drukowanych otrzymanych przy użyciu przygotowanego atramentu w firmie QWERTY była na poziomie 1500-1600 cd/m².

Podziękowania

Badania wykonano w ramach projekt „Nauka i biznes to dobre połączenie!” - POKL.08.02.01-10-001/13.



Modyfikowane nanorurki tytanianowe do usuwania zanieczyszczeń chemicznych

M.Marć¹, M.R. Dudek¹, J.J. Kozioł², B. Zapotoczny¹

¹*Instytut Fizyki, Uniwersytet Zielonogórski*

²*Wydział Nauk Biologicznych, Uniwersytet Zielonogórski*

Nanorurki tytanianowe to efekt syntezy hydrotermalnej ditlenku tytanu (TiO₂) w środowisku silnie zasadowym. Materiał cieszy się niesłabnącym zainteresowaniem od ponad dwóch dekad. Wykorzystywany jest między innymi w fotokatalizie, fotowoltaice, w zastosowaniach biomedycznych, czy jako sorbent, do oczyszczania powietrza lub wody [2,3].

Efektywne oczyszczanie ścieków ze związków organicznych to współczesny problem ochrony środowiska. Barwniki wytwarzane przez przemysł odzieżowy i drukarski dostając się do środowiska wodnego zmniejszają transmisję światła oraz działają toksycznie i rakotwórczo na organizmy żywe [4].

Przedstawiony zostanie nowy materiał na bazie nanorurek tytanianowych i nanocząstek Fe₃O₄ oraz wyniki badań nad usuwaniem błękitu metylenowego jako modelowego zanieczyszczenia chemicznego z wody. Do identyfikacji otrzymanych struktur nanorurkowych wykorzystano techniki: mikroskopii elektronowej (SEM, TEM), mikroskopii sił atomowych (AFM) oraz spektroskopii Ramana.

Literatura

- [1] D. L. Morgan, H. Liu, R. L. Frost, and E. R. Waclawik, *J. Phys. Chem. C*, 2010, **114**, 101–110.
- [2] T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Sekino, and T. Majima, *J. Phys. Chem. B*, 2006, **110**, 14055–14059.
- [3] L. Xiong, Y. Yang, J. Mai, W. Sun, Chaoying Zhang, D. Wei, Q. Chenc, J. Ni, , *Chem. Eng. J.*, 2010, **156**, 313–320.
- [4] R. Baan, K. Straif, Y. Grosse, B. Secretan, F. Ghissassi, V. Bouvard, L. Benbrahim-Tallaa, V. Coglian, *Lancet Oncol.*, 2008, **9**, 322–323.



Efektywna liczba Poissona i moduł Younga w drganiach ciał termosprężystych

Bogdan T. Maruszewski, Andrzej Drzewiecki, Roman Starosta

Institut Mechaniki Stosowanej, Politechnika Poznańska
bogdan.maruszewski@put.poznan.pl,
andrzej.drzewiecki@put.poznan.pl,
roman.starosta@put.poznan.pl

Oddziaływania między polami sprężystym i termicznym są badane od wielu lat. Jednym z bardziej ciekawych zjawisk jest zjawisko tzw. tłumienia termosprężystego. W przypadku ciała o skończonych wymiarach, np. płyty, w czasie drgań giętnych górne i dolne włókna są naprzemiennie ściskane i rozciągane powodując wystąpienie dodatkowego strumienia ciepła płynącego prostopadle do powierzchni środkowej. Jest on odpowiedzialny za dodatkowe rozpraszanie energii różne od tego, które towarzyszy klasycznym oddziaływaniom termosprężystym. Matematycznie problem staje się dwu-trójwymiarowy. Praca dotyczy badania drgań wymuszonych prostokątnej płyty uwzględniając relaksacyjny charakter pola termicznego. Określono postaci efektywnych liczby Poissona oraz modułu Younga w materiałach klasycznych i auksetycznych w procesie drgań.



Badanie procesu uwalniania substancji czynnej z termoczulych nośników hydrożelowych

Magdalena N. Olejniczak, Krzysztof Piechocki, Jan S. Owczarek,
Marcin Kozanecki

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

Potrzeby medycyny, farmacji i innych gałęzi przemysłu są motorem badań nad technologicznie zaawansowaną klasą tworzyw, jaką są biomateriały. Do tej grupy należą termoczule hydrożele polimerowe, wykazujące Objętościowe Przejście Fazowe (OPF). Po zmianie temperatury następuje zachwianie równowagi pomiędzy oddziaływaniami hydrofilowymi i hydrofobowymi polimeru z wodą i woda wypychana jest na zewnątrz sieci polimerowej [1]. Materiały te stanowią ciekawą alternatywę dla dotychczas używanych nośników w kontrolowanym uwalnianiu leków takich jak mikrokapsułki, czy biokoniugaty. Do grupy polimerów termoczulych należy m. in. poli(metakrylan 2-(2-metoksytoksy) etylu (PMEO₂MA), którego wysoka chłonność wody, brak toksyczności oraz ostre OPF sprawiają, że jest on obiecującym materiałem na nośniki leków [2].

W pracy przedstawiono zdolność do chłonięcia wodnych roztworów substancji czynnej w postaci soli sodowych niesteroidowych leków przeciwzapalnych, a także wpływ OPF na kinetyki ich uwalniania.

Podziękowania

Pracę współfinansowano ze środków Narodowego Centrum Nauki (grant nr 2013/09/B/ST4/03010) oraz ze środków Funduszu Młodych Naukowców na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej

Literatura

- [1] Y. Qiu, K. Park, *Advanced Drug Delivery Reviews*, 2012, **64**, 49-60
- [2] J.F. Lutz, *Advanced Materials*, 2011, **23**, 2237-2243



Kilka uwag o pracy prof. Tadeusza Pakuły jako autora unikalnych algorytmów symulacyjnych. Algorytmy CMA i DLL – jak to działa?

Piotr Polanowski, Jarosław Jung, Krzysztof Hałagan

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

W ostatnich latach symulacje komputerowe, szczególnie w przypadku złożonych układów molekularnych, stały się jednym z podstawowych narzędzi badawczych. Niemniej techniki te w sposób naturalny ograniczone są skalami czasu i rozmiaru. Trudności wynikają także z koncepcji stosowanych algorytmów, nie zawsze dobrze odzwierciedlających rzeczywistą sytuację fizyczną (zwłaszcza dynamikę). Podczas wykładu przedstawione zostaną dwa bardzo wydajne algorytmy symulacyjne CMA (w j. ang. *Cooperative Motion Algorithm*) i DLL (w j. ang. *Dynamic Lattice Liquid*) [1], dla których przestrzeń konfiguracyjną stanowi sieć przestrzenna. Zostały one oparte o koncepcje ruchów kooperatywnych autorstwa profesora Tadeusza Pakuły. Unikalną cechą obu prezentowanych metod jest, to że każdy węzeł sieci jest zajęty przez element biorący udział w symulacji. Właściwość ta jest wyjątkowo istotna w przypadku symulacji układów gęstych takich jak ciecze, stopy polimerowy itp. Algorytm CMA jest bardzo szybkim algorytmem sekwencyjnym natomiast algorytm DLL jest algorytmem równoległym i bezpośrednio definiuje maszynę, która może go realizować.

Literatura

[1] T. Pakuła, *Simulation of Completely Occupied Lattice in Simulation Method for Polymers* edited by Michael Kotelyanskii, Doros N. Theodorou, Marcel Dekker, Inc., New York –Basel, 2004, 147-176.



Zastosowanie algorytmu dynamicznej cieczy sieciowej w badaniu transportu cieczy w ośrodkach złożonych

Piotr Polanowski¹, Andrzej Sikorski²

¹ Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

² Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski

Transport cieczy w ośrodkach złożonych odgrywa kluczową rolę wielu dziedzinach: układach biologicznych, przenikaniu wody przez ośrodki porowate, transporcie w szklach i cieczach przechłodzonych oraz wielu innych. W pracy prezentujemy badania oparte o symulacje wykorzystujące koncepcję ruchów kooperatywnych w ośrodkach zawierających przeszkody. Głównym celem było udzielenie odpowiedzi na pytanie: jak cząsteczki cieczy poruszają się w ośrodku o złożonej strukturze, biorąc pod uwagę fakt, że w rzeczywistych układach ruch poszczególnych cząsteczek cieczy jest ściśle skorelowany z ruchem innych elementów ośrodka? W celu odpowiedzi na to pytanie wykorzystaliśmy symulację opartą o model DLL (*Dynamic Lattice Liquid*) [1], która może pracować przy współczynniku wypełnienia sieci równym 1, gdy wszystkie węzły sieci są zajęte przez elementy układu biorące udział w symulacji. W ramach tego modelu badaliśmy zmiany dynamiki cieczy na poziomie mikroskopowym zachodzące wraz z zwiększaniem stężenia przeszkód w badanych układach. W pobliżu punktu perkolacji zaobserwowaliśmy istotne różnice w stosunku do wyników przewidywanych przez teorię, co należy wiązać z mechanizmem transportu [2].

Podziękowania

Badanie zostało wykonane w ramach grantu NCN UMO-2013/09/B/ST5/00093

Literatura

- [1] P. Polanowski, T. Pakuła, *J. Chem. Phys.*, 2003, **118**, 11139.
- [2] P. Polanowski, A. Sikorski, *Soft Matter*, 2014, **10**, 3597.



Badanie dyfuzji wody z użyciem metody Monte-Carlo w dwuskładnikowych układach woda-polimer

Jakub Saramak, Krzysztof Hałagan, Marcin Kozanecki,
Piotr Polanowski

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

Polimery i hydrożele czułe na bodźce są nowymi materiałami znajdującymi coraz liczniejsze zastosowania jako m.in.: mikrozawory, systemy do kontrolowanego dozowania leków, indykatory i sensory chemiczne, soczewki o zmiennej ogniskowej [1,2]. W układach dwuskładnikowych woda-polimer Maeda [3] wyróżnił trzy stany wody: wodę pierwszorzędową w bezpośrednim sąsiedztwie łańcucha polimerowego, wodę drugorzędową będącą w kolejnych strefach hydratacyjnych i woda typu „bulk”. Wiedza o ruchliwości cząsteczek wody w różnych stanach jest kluczowa dla zrozumienia zjawisk towarzyszących dyfuzji przez membrany polimerowe, procesom uwalniania substancji bioaktywnych z nośników hydrożelowych, przejściom konformacyjnym, czy objętościowemu przejściu fazowemu. W niniejszej pracy dyskutowany będzie wpływ długości łańcuchów i stężenia polimeru na dynamikę rozpuszczalnika w układach gęstych w przypadku atermicznym za pomocą metody Monte Carlo wykorzystującej dynamikę kooperatywną DLL [4].

Podziękowania

Badania współfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki (grant nr 2013/09/B/ST4/03010).

Literatura

1. Li Y. et al. *Chem. Soc. Rev.*, 2012, **41**, 2193
2. Pastorczak M. (2010) PhD thesis, Lodz University of Technology
3. Maeda Y, Kitano H., *Spectrochim Acta A*, 1995, **51**, 243
4. Saramak J. et al., *J. Mol. Model.*, 2014, **20**, 2529



Polimery cykliczne: struktura, dynamika, zastosowania. Stan badań i perspektywy

Andrzej Sikorski¹, Aleksander Kuriata¹ i Piotr Polanowski²

¹ Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski

² Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

Przewidywanie własności układów zawierających cykliczne makrocząsteczki jest obecnie jednym z ciekawszych problemów w teorii polimerów. Jest to ważny problem także z praktycznego punktu widzenia, jako że polimery takie są precyzyjnie projektowane, syntezowane i charakteryzowane. Przedstawione zostaną własności różnych układów zawierających takie polimery: w rozcieńczonych roztworach, w gęstych cieczach polimerowych, zaadsorbowane na powierzchniach czy wreszcie w ograniczonej przestrzeni. Omówione zostaną zarówno homopolimery oraz różnego rodzaju kopolimery. Przedstawione zostaną modele takich układów oraz wyznaczanie własności tych modeli za pomocą metod symulacji komputerowej, z wykorzystaniem różnych algorytmów symulujących. Metody symulacji komputerowej pozwalają na zbadanie używanych przez teorie modeli, weryfikację przybliżeń zastosowanych w teoriach analitycznych oraz na przewidywanie własności układów, które trudno jest wyznaczyć eksperymentalnie. Wskazane zostaną różnice w strukturze łańcuchów w zależności od ich architektury oraz od sekwencji merów, a także mechanizmy ruchu makrocząsteczek skutkujące odpowiednimi własnościami lepkością.

Literatura

- [1] S. Żerko, P. Polanowski i A. Sikorski, *Soft Matter*, 2012, **8**, 973.
- [2] A. Kuriata i A. Sikorski, *J. Mol. Model.*, 2015, **21**, 56.



Fotogeneracja nośników ładunku i efekt fotowoltaiczny w układach P3HT:PCBM

Anna Stefaniuk-Grams, Jarosław Jung, Jacek Ulański

Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka

W ostatnich latach, w wielu laboratoriach na świecie, prowadzone są intensywne badania właściwości półprzewodników organicznych przeznaczonych do zastosowań w ogniwach fotowoltaicznych. Podstawowym parametrem charakteryzującym materiał, które wykazują fotoprzewodnictwo i efekt fotowoltaiczny jest wydajność kwantowa fotogeneracji.

Podczas prezentacji omówione zostaną wyniki badań wydajności kwantowej fotogeneracji oraz efektu fotowoltaicznego w układach składających się z polimerowej matrycy typu-*p* (poli(3-heksylotiofen - P3HT) domieszkowanej pochodną fullerenu C₆₀ - PCBM) typu-*n* [1]. Wydajność fotogeneracji wyznaczano analizując zaniki fotoindukowanego potencjału powierzchniowego mierzone metodą rozładowania kserograficznego [2], a efekt fotowoltaiczny badano na podstawie charakterystyk prądowo-napięciowych oświetlanych ogniw fotowoltaicznych. Zaobserwowano, że PCBM nie tylko pośredniczy w dysocjacji ekscytonów powstałych w P3HT, ale fotogeneracja nośników ładunku może także zachodzić z dużą wydajnością bezpośrednio w obrębie fazy heterozłącza zawierającej cząsteczki PCBM.

Podziękowania:

Projekt został sfinansowany przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach programu „Diamentowy Grant” nr DI2012 022342.

Literatura

- [1]. T. Liu, A. Troisi, *Advanced Materials*, 2013, **25**, 1038–1041.
- [2]. I. Glowacki, J. Jung, J. Ulański J, A. Rybak, *Conductivity Measurements – rozdział w Polymer Science: A comprehensive reference* 2012, 847 – 877.



Wpływ rozpuszczalnika na morfologię oraz parametry pracy organicznych tranzystorów z efektem polowym

Izabela Tszydel¹, Magdalena Kucińska¹, Tomasz Makowski², Andrzej Nosal³, Maciej Gazicki-Lipman³, Jacek Ulański¹

¹ *Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka, Łódź*

² *Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Łódź*

³ *Instytut Inżynierii Materiałowej, Politechnika Łódzka*

W prezentowanej pracy badany był wpływ rodzaju rozpuszczalnika na morfologię warstw pochodnej naftalenu PTCDI-C5, uzyskiwanych metodą wylewania na wirujące podłoże oraz parametry pracy. Analizowana była także korelacja pomiędzy morfologią warstw tego organicznego półprzewodnika typu *n*, a parametrami pracy tranzystorów z efektem polowym. Warstwy PTCDI-C5 były nanoszone na podłoże szklane z naparowanymi elektrodami źródła i drenu; następnie na warstwę PTCDI-C5 była nanoszona warstwa Parylenu C pełniąca rolę izolatora bramki oraz zabezpieczająca warstwę aktywną przed szkodliwymi czynnikami atmosferycznymi; na warstwę Parylenu C naparowywano elektrodę bramki. Morfologia wytworzonych warstw zbadana za pomocą Mikroskopii Sił Atomowych wykazuje znaczące różnice w zależności od użytego rozpuszczalnika. Stwierdzono silną korelację pomiędzy morfologią i parametrami pracy tranzystorów; najlepsze tranzystory, wykazujące ruchliwość elektronów rzędu $10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ uzyskano dla warstw polikrystalicznych z największymi ziarnami PTCDI-C5 uzyskanymi z chlorobenzenu.

Podziękowania

Praca została wykonana w ramach projektu NCN 2012/07/B/ST8/ oraz subsydium profesorskie Mistrz z Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej.



Kontrolowana krystalizacja półprzewodników organicznych w matrycach polimerowych

Jacek Ulański

*Katedra Fizyki Molekularnej i Europejskie Centrum Bio- i Nanotechnologii
Politechniki Łódzkiej*

Kryształy molekularne wykazujące właściwości elektryczne typowe dla metali lub półprzewodników od kilkudziesięciu lat są obiektem zainteresowania naukowców ze względu na obserwowane w nich niezwykle zjawiska oraz na możliwość ich zastosowania w szybko rozwijającej się technologii elektroniki organicznej. Od dawna poszukiwano metod wytworzenia kompozytów polimerowych z udziałem kryształów molekularnych, które łączyłyby w sobie właściwości elektryczne kryształów z właściwościami mechanicznymi i użytkowymi polimerów. Opracowana w latach 80-ych ubiegłego wieku metoda tzw. domieszkowania siateczkowego [1] i technika wylewania strefowego umożliwiły wytworzenie szerokiej klasy organicznych materiałów funkcjonalnych [2] oraz materiałów wykazujących bardzo wysoką anizotropię przewodnictwa [3]. Na wykładzie omówiony będzie rozwój technik wywodzących się z metody domieszkowania siateczkowego, który doprowadził do opracowania nowych metod wytwarzania elementów elektroniki organicznej, stosowanych obecnie w laboratoriach badawczych na całym świecie [4,5].

Podziękowania

Przedstawione badania były częściowo finansowane z subsydium profesorskiego Master9./2014 Fundacji na rzecz Nauki Polskiej.

Literatura

- [1] J. K. Jeszka, J. Ulański and M. Kryszewski, *Nature*, 1981, **289**, 390.
- [2] J. Ulański, A. Tracz and M. Kryszewski, *J. Phys. D.: Appl. Phys.*, 1985, **18**, 451.
- [3] L. Burda, A. Tracz, T. Pakula, J. Ulański and M. Kryszewski, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1983, **16**, 1737.
- [4] W. Pisula i in., *Adv. Mater.*, 20056, 684
- [5] I. Tsydel i in., *Adv. Funct. Mat.*, 2012, **22**, 3840



Algorytmy do śledzenia ruchu dyslokacji w symulacjach dynamiczno-molekularnych

Szymon Winczewski, Jacek Dziedzic, Jarosław Rybicki

*Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej
wisnia@kdm.task.gda.pl, jaca@kdm.task.gda.pl, ryba@pg.gda.pl*

Znaczny wzrost dostępnych mocy obliczeniowych sprawił, że stosując metody dynamiki molekularnej można obecnie badać właściwości układów składających się nawet z milionów atomów. Dostępność nowych skal długości i czasu poskutkowała zastosowaniem metod dynamiczno-molekularnych w przypadku badań nad właściwościami dyslokacji, liniowych defektów struktury krystalicznej, posiadających istotny wpływ na właściwości mechaniczne materiałów. Jednak w obszarze badań obliczeniowych nad właściwościami dyslokacji wciąż zauważa się nierozwiązane problemy. Jako jeden z najbardziej istotnych wskazać należy problem algorytmicznego śledzenia ruchu dyslokacji, przemieszczających się w symulowanym materiale pod wpływem czynników zewnętrznych.

Przedstawiona zostanie opracowana nowa metoda obliczeniowa, służąca do śledzenia ruchu dyslokacji w symulacjach dynamiczno-molekularnych. Poglądowo przedstawione zostanie stosowane w ramach metody podejście. Pokazane zostanie, że opracowana technika śledzenia ruchu dyslokacji charakteryzuje się wysoką wydajnością, i pozwala efektywnie realizować analizę w przypadku układów bardzo dużych, stanowiących nawet przez miliony atomów. Referat zakończony zostanie prezentacją przykładów zastosowania opracowanej metody. Przedstawione zostaną wyniki badań nad ruchliwością dyslokacji krawędziowych w monokryształach molibdenu.

Podziękowania

Praca naukowa została sfinansowana ze środków budżetowych na naukę w latach 2013-2015 nr projektu IP2012 043972. Praca została wykonana z wykorzystaniem Infrastruktury PL-Grid. Część obliczeń przeprowadzono w Centrum Informatycznym Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej.



Fotofizyka oligotiofenowych pochodnych diketopirolopiroli i ich zastosowanie jako emiterów w diodach elektroluminescencyjnych

Gabriela Wiosna-Sałyga¹, Monika Góra², Małgorzata Zagórska³, Beata
Łuszczynska¹, Ireneusz Głowacki¹, Jacek Ulański¹,
Adam Proń³

¹ *Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka*

² *Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski*

³ *Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska*

Badano właściwości fotofizyczne, elektrochemiczne oraz transportowe serii związków typu donor-akceptor-donor, składających się z centralnej jednostki diketopirolopirolowej – DPP (akceptor), do której przyłączono elektronodonorowe grupy mono -- (seria **T1**), bi - (seria **T2**) i tertiofenowe (seria **T3**). Wszystkie związki badane w roztworze wykazują fotoluminescencję, która jest wygaszana w miarę jak długości podstawnika oligotiofenowego rośnie (wydajność kwantowa emisji maleje od 75% dla serii **T1** do 20% dla serii **T3**). Dodatkowo długości segmentów donorowych mają istotny wpływ na energię poziomu HOMO, a także w pewnym stopniu na energię poziomu LUMO badanych związków. Związki te zostały zastosowane do wytwarzania warstw aktywnych w diodach elektroluminescencyjnych typu gość - gospodarz, w których matrycę stanowiła mieszanina poli(*N*-winylokarbazolu) i 2-*tert*-butylofenylo-5-bifenylo-1,3,4-oksadiazolu.

Podziękowania

Prezentowana praca była finansowana przez: postdoktorski grant NCN No. 2012/04/S/ST4/00128, projekt NCN PRELUDIUM 5, 2013/09/N/ST5/02987 oraz przez UE z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego poprzez Program Fundacji na rzecz Nauki Polskiej w ramach Międzynarodowego Studium Doktoranckiego “Towards Advanced Functional Materials and Novel Devices” (MPD/2010/4).



Właściwości fotofizyczne nowych kompleksów metali

Ewelina Witkowska^{1,2}, Gabriela Wiosna-Sałyga¹, Beata Łuszczyńska¹,
Ireneusz Głowacki¹, Jacek Ulański¹

¹*Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka*

²*Doktoranckie Koło Naukowe Nanotechnologów NANO, Łódź*

Poszukiwanie nowych emiterów do zastosowania w polimerowych diodach elektroluminescencyjnych (z ang. *Polymer Light-Emitting Diodes*) (PLED) jest obecnie jednym z głównych nurtów badań w obszarze elektroniki organicznej [1]. Charakteryzacja właściwości fotofizycznych kompleksów metali jako efektywnych emiterów dla PLEDów była głównym celem badań. Umożliwia ona odpowiedni dobór składu kompozytów w celu osiągnięcia największej wydajności luminescencji [2]. Jako matrycę zastosowano mieszaninę poli(*N*-winylokarbazolu) (PVK) z 40% mas. pochodnej oksadiazolu (PBD). Matrycę PVK/PBD domieszkowano badanymi emiterami w zakresie stężeń od 1 do 5% mas. Zaobserwowano duży stopień przekrywania się widma emisyjnego matrycy PVK/PBD z widmami absorpcyjnymi badanych kompleksów emisyjnych, co sprzyja wydajnemu transferowi energii z cząsteczek matrycy na cząsteczki domieszki według mechanizmów Förstera i Dexter'a [3].

Podziękowania

Autorzy składają podziękowania grupie prof. Marcińca z Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu oraz grupie dr hab. Lulińskiego z Politechniki Warszawskiej za dostarczenie kompleksów metali ciężkich. Praca była częściowo finansowana przez Narodowe Centrum Nauki jako projekt badawczy nr UMO-2013/11/B/ST5/01334.

Literatura

- [1] K. Durka et al., *Journal of Materials Chemistry C*, 2015, **3**, 1354-1364
- [2] R. Grykien, I. Głowacki, *Inżynieria Materiałowa*, 2011, **5**, 873-878.
- [3] X. H. Yang and D. Neher, *Applied Physics Letters*, 2004, **84**, 2476-2478.



Symulacje komputerowe stałych sprężystości za pomocą metody kolejnych minimalnych obrazów

Krzysztof W. Wojciechowski, Konstantin V. Tretiakov

Instytut Fizyki Molekularnej PAN, Poznań

Przedstawiona zostanie metoda minimalnych obrazów, którą ostatnio zaproponowano [1] do wyznaczania stałych sprężystości układów cząstek z oddziaływaniem Lennarda-Jonesa (LJ). Stałe sprężystości wyznaczono w granicy termodynamicznej, $N \rightarrow \infty$, używając metody Monte Carlo (MC) w zespołach NVT i NPT. Wyniki symulacji wskazują, że wkład długo-zasięgowych oddziaływań nie może być w tym przypadku zaniedbany. Symulacje pokazały też, że uwzględnienie dalszych oddziaływań każdej cząstki ze wszystkimi jej drugimi minimalnymi obrazami daje wyniki bardzo bliskie tym, które otrzymuje się w granicy termodynamicznej. Pozwala to na łatwą, szybką i dość dokładną ocenę wartości stałych sprężystości przy użyciu w symulacjach bardzo małych próbek.

Podziękowania

Część pracy wykonano w ramach grantów N N202 261438 (MNiSW) i DEC-2012/05/B/ST3/03255 (NCN). Część obliczeń zrealizowano w Poznańskim centrum Superkomputerowo-Sieciowym.

Literatura

[1] K. V. Tretiakov, K. W. Wojciechowski, *Computer Physics Communications*, 2015, **189**, 77–83.



Zachowanie fazowe stopów i roztworów niesymetrycznych kopolimerów trójblokowych

Sebastian Wołoszczuk

Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Niesymetryczne kopolimery trójblokowe A1BA2 wykorzystuje się do badania w systematyczny sposób przejścia od kopolimeru dwublokowego do trójblokowego. Dla kopolimerów dwublokowych i symetrycznych kopolimerów trójblokowych zwiększenie masy (długości) łańcucha (N) promuje termodynamiczną niezgodność i niemieszalność, która stabilizuje struktury uporządkowane. Z drugiej strony wiadomo zarówno z eksperymentu [1] jak również z obliczeń Monte Carlo [2], że stopniowe dołączanie bloku A2 do dwublokowego rdzenia A1B powoduje, że na diagramie N-TODT występuje wyraźne minimum odpowiadające za stabilizację fazy nieuporządkowanej wraz ze wzrostem N dla krótkich A2. Zachowanie to ma bardzo interesujące konsekwencje, również z punktu widzenia zastosowań praktycznych.

W obliczeniach wykorzystujemy sieciową metodę Monte Carlo (CMA). W systematyczny sposób badamy stopy niesymetrycznego kopolimeru A1BA2 [3-5], jak również jego roztwory w selektywnym rozpuszczalniku. Celem jest oszacowanie wpływu asymetrii kopolimeru oraz selektywności i objętości ułamkowej rozpuszczalnika na własności strukturalne i zachowanie fazowe takich układów.

Literatura

- [1] M. W. Hamersky, S. D. Smith, A. O. Gozen, R. J. Spontak, *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**, 168306
- [2] S. Wołoszczuk, M. Banaszak, R. J. Spontak, *J. Pol. Sci. Part B: Pol. Phys.*, 2013, **51** (5), 343-348
- [3] M. Dziecielski, S. Wołoszczuk, M. Banaszak, *Polimery*, 2014, **59** (7-8), 850-854
- [4] S. Tallury, K. Mineart, S. Wołoszczuk, D. Williams, R. Thompson, M. Pasquinelli, M. Banaszak, R. Spontak, *J. Chem. Phys.*, 2014, **141**, 121103
- [5] S. Wołoszczuk, K. Mineart, R. Spontak, M. Banaszak, *Phys. Rev. E*, 2015, **91**, 010601(R)