

LAMMPS JAKO NARZĘDZIE W DYNAMICE MOLEKULARNEJ  
NA PRZYKŁADZIE MODELOWANIA POTENCJAŁU MIĘDZYWARSTWOWEGO  
W STRUKTURACH GRAFENOWYCH

dr Zbigniew Kozioł, LBM, NCBJ

miejsce: PNT, sala 223 (Neutron),  
termin: 5 kwietnia 2017 r. (środa), godzina 11:30

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) jest dominującym oprogramowaniem do modelowania zjawisk fizycznych i własności inżynierskich szerokiej gamy materiałów w oparciu o dynamikę molekularną. Przedstawione zostaną ogólne przykłady jego możliwości. Skupimy się na wyjaśnieniu modelowania potencjału oddziaływania między warstwami grafenu. Wyniki rzucają światło na mechanizm powstawania w procesach technologicznych nakładających się na siebie warstw grafenowych. Uzyskany potencjał oddziaływań dobrze odtwarza podstawowe własności materiałowe oraz sugeruje możliwość występowania w materiale nieoczekiwanego rodzaju (nie)uporządkowania warstw.

Zapraszam  
Cezary Pochrybniak