

STRESZCZENIE

AUTOR /nazwisko, imię /: Dziegielewska, Przemysław

TYTUŁ : Szklą metaliczne Zr-Cu w warunkach wysokiego ciśnienia

STRONY: 170

PROMOTOR /imię, nazwisko, tytuł nauk./: Jerzy, Antonowicz, dr hab. inż.

STRESZCZENIE PRACY /14-16 wierszy/

Rodzaj pracy: doktorska
~~habilitacyjna~~

Praca doktorska obejmuje analizę struktury atomowej i elektronowej otrzymanych na drodze symulacji dynamiki molekularnej trzech amorficznych stopów: $Zr_{67}Cu_{33}$, $Zr_{50}Cu_{50}$, $Zr_{33}Cu_{67}$ w warunkach hydrostatycznego ciśnienia w zakresie 0 – 100 GPa.

W pracy zawarto opis podstawowych właściwości strukturalnych i elektronowych szkieł metalicznych oraz znanych wyników badań wpływu wysokiego ciśnienia na te materiały. Przedstawiono także opis wykorzystanych metod badawczych i symulacyjnych (metoda EXAFS, dynamika molekularna, DFT).

Na podstawie analizy struktury atomowej wykazano, że rosnące ciśnienie prowadzi do zmian lokalnego uporządkowania, w której dominującym motywem stają się klastry o symetrii ikosaedru. Ponadto, w strukturze poddanej ciśnieniu powyżej 50 GPa zaobserwowano powstawanie znacząco skróconych par Zr-Zr. Wykazano, że powstawanie tych par jest możliwe dzięki zmianom zachodzącym w strukturze elektronowej tj. zmianie rodzaju wiązania z metalicznego na wiązanie o charakterze wiązania kowalencyjnego oraz transferowi ładunków ze stanów *s* i *p* Cu do stanów *d* Zr oraz redystrybucji ładunku atomów Zr.