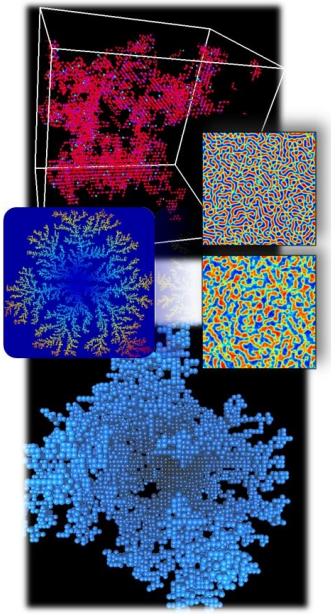
POLISH NATIONAL AGENCY FOR ACADEMIC EXCHANGE

STER PROGRAMME

nazwa jednostki:		symbol:
ZESPÓŁ MODELOWANIA MOLEKULARNEGO Katedra Fizyki Molekularnej Politechniki Łódzkiej		K-31 http://www.kfm.p.lodz.pl
kierownik:	potencjalni promotorzy:	osoba do kontaktu:
Dr hab. Piotr Polanowski, prof. uczelni	Dr hab. Piotr Polanowski, prof. uczelni Dr inż. Krzysztof Hałagan	Dr Krzysztof Hałagan tel: 42-631-3288 krzysztof.halagan@p.lodz.pl

zakres działalności:

Główny nurt badań obejmuje symulacje komputerowe metodami Monte Carlo złożonych układów polimerowych. W symulacjach cieczy prostych i złożonych wykorzystujemy głównie model dynamicznej cieczy sieciowej (ang. Dynamic Lattice Liquid - DLL). DLL jest prostym modelem dynamiki cieczy zakładającym kooperatywny ruch cząstek w postaci zamkniętych pętli. W układzie nie są wymagane puste miejsca, co pozwala symulować układy gęste, natomiast skala czasowa jest zawarta w sposób naturalny, gdyż pętle generowane są równolegle w całym systemie. Model ten pomyślnie znalazł zastosowanie w wielu zagadnieniach badawczych: dynamice łańcuchów, szczotek, gwiazd i sieci polimerowych oraz rozpuszczalnika, procesu separacji faz, agregacji molekularnej, zagadnień dyfuzji polimeru, modelowania reakcji chemicznych, w tym kontrolowanej polimeryzacji, transportu molekularnego w układach o ograniczonej geometrii. Dodatkowo zajmujemy się symulacjami dynamiki molekularnej (MD) mieszanin i roztworów polimerowych oraz obliczeniami kwantowymi dla związków organicznych do zastosowania w elektronice organicznej i biologicznie aktywnych. Kolejnym polem zainteresowań jest wykorzystanie w symulacjach molekularnych dedykowanych maszyn obliczeniowych, takich jak zbudowany w łódzkim Bionanoparku, oparty o układy FPGA Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych (ARUZ). Prowadzimy również prace nad implementacją nowych modeli komputerowych, także z wykorzystaniem technik obliczeń równoległych. Posiadamy ścisłą współpracę z eksperymentatorami w dziedzinie chemii i fizyki polimerów oraz elektronikami.



działalność obecna:

- Symulacje komputerowe dynamiki szczotek polimerowych i rozpuszczalnika.
- Badanie relacji między strukturą i dynamiką w układach polimerowych o różnych geometriach.
- Modelowanie kontrolowanej reakcji polimeryzacji makrocząsteczek.
- Symulacje transportu molekularnego w układach o ograniczonej geometrii.
- Zastosowanie maszyn dedykowanych (ARUZ) w symulacjach molekularnych.
- Obliczenia kwantowe dla związków organicznych do zastosowania w elektronice organicznej i biologicznie aktywnych (pochodne adenozyny, metalokarborany).
- Symulacje dynamiki molekularnej mieszanin polimerowych, np. PMMA, PLA i pochodnych oraz układów wodnych.
- Korelacja wyników eksperymentalnych i symulacyjnych uzyskanych z wykorzystaniem modeli o różnych poziomach ogólności.

przyszłe działania:

Rozwój modeli komputerowych do symulacji układów złożonych, rozwój metod do zastosowania w maszynach dedykowanych

The portfolio of research groups was created as part of the Programme "STER" – Internationalisation of doctoral schools" as part of the realization of the project "Curriculum for advanced doctoral education & taining – CADET Academy of Lodz University of Technology".

publikacje/patenty/nagrody/granty:

- K. Hałagan, M. Banaszak, J. Jung, P. Polanowski, A. Sikorski, “Polymerization and Structure of Opposing Polymer Brushes Studied by Computer Simulations”; Polymers 13(24), 4294 (2021). DOI: 10.3390/polym13244294
- P. Filipczak, K. Hałagan, J. Ulanski, M. Kozanecki, “Surface-Enhanced Raman Scattering of Water in Aqueous Dispersions of Silver Nanoparticles”; Beilstein J. Nanotechnol. 12, 497-506 (2021). DOI: 10.3762/bjnano.12.40
- P. Polanowski, A. Sikorski; "The structure of polymer brushes: The transition from dilute to dense systems: A computer simulation study"; Soft Matter 17(46), 10516–10526 (2021). DOI: 10.1039/d1sm01306h
- R. Kiełbik, K. Hałagan, W. Zatorski, J. Jung, J. Ulański, A. Napieralski, K. Rudnicki, P. Amrozik, G. Jabłoński, D. Stożek, P. Polanowski, Z. Mudza, J. Kupis, P. Panek; „ARUZ - Large-scale, Massively Parallel FPGA-based Analyzer of Real Complex Systems”; Computer Physics Communications 232, 22 – 34 (2018). DOI: 10.1016/j.cpc.2018.06.010

słowa kluczowe:

symulacje komputerowe, dynamika kooperatywna, dynamika molekularna, złożone układy polimerowe

lista propozycji staży w danej grupie badawczej:

- Współpraca w zakresie symulacji dynamiki molekularnej właściwości makroskopowych mieszanin polimerowych.
- Implementacja nowych modeli numerycznych dla symulacji Monte Carlo.