

Imię i nazwisko autora rozprawy	Michał Kański
Rok urodzenia autora rozprawy	1991
Imię i nazwisko promotora rozprawy	Zbigniew Postawa
Wydział	Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Instytut/ Katedra	Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego
Dziedzina wg klasyfikacji KBN	Fizyka
Nadawany tytuł	Doktor

Tytuł rozprawy w języku polskim	Opracowanie pola siłowego typu ReaxFF do symulacji procesu rozpylania materiałów organicznych
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	Dynamika molekularna, rozpylanie, pola siłowe
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	<p>Głównym celem niniejszej pracy doktorskiej było opracowanie parametryzacji potencjału ReaxFF przystosowanego do modelowania procesów rozpylania w układach złożonych z atomów węgla, wodoru i tlenu. Jego pierwsza wersja, obejmująca wyłącznie węglowodory, została wykorzystana do wzbogacenia wiedzy wynikającej z badań eksperymentalnych dotyczących zachowania układów organicznych bombardowanych przez duże klastry argonu, ze szczególnym uwzględnieniem kątów emisji i energii kinetycznej rozpylonych cząstek.</p> <p>Po rozszerzeniu potencjału o tlen, pochyliłem się nad jednym z najgorętszych obecnie tematów w społeczności SIMS, tj. wykorzystania dużych klastrów molekuł wody, które pozwalają na zwiększenie sygnału od emitowanych zjonizowanych fragmentów nawet o dwa rzędy wielkości w porównaniu do klastrów argonu o podobnej wielkości! Moim celem było rzucenie światła na możliwy mechanizm odpowiedzialny za wystąpienie tego wzmocnienia.</p>

Tytuł rozprawy w języku pracy *	
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	

Tytuł rozprawy w języku angielskim	Development of a ReaxFF-like force field for modelling sputtering of organic materials
Słowa kluczowe (maksymalnie 5)	Molecular dynamics, sputtering, force field
Streszczenie rozprawy (maksymalnie 1 400 znaków)	<p>The main goal of this dissertation was to develop the parameterization of the ReaxFF potential adapted for modelling the sputtering processes in systems composed of carbon, hydrogen, and oxygen atoms. Its first version, covering only hydrocarbons, was used to enrich the knowledge resulting from experimental studies on the behaviour of organic systems bombarded by large argon clusters, with particular emphasis on emission angles and kinetic energy of sputtered particles.</p> <p>After expanding the potential to oxygen, I studied one of the hottest currently topics in the SIMS community - large water clusters that allow the signal from emitted ionized fragments to be increased by up to two orders of magnitude compared to argon clusters of similar size! My goal was to shed light on the possible mechanism responsible for the existence of this amplification.</p>

* Jeżeli rozprawa jest napisana w języku polskim wystarczy wypełnić pierwszą rubrykę.

Michał Kański