

Streszczenie

Ciekłe kryształy (CK) to mezofaza, która łączy właściwości cieczy i ciał stałych. Są one powszechnie obecne w przyrodzie i stanowią podstawę technologii wyświetlaczy ciekłokrystalicznych (ang. *liquid-crystal display* – LCD). Nematyki są rodzajem CK, w których gęstość układu jest jednorodna, ale cząsteczki orientują się w preferowanym kierunku. Od ich odkrycia w 1888 roku przez Reinitzera, kolejne cztery generacje nematyków zostały zidentyfikowane eksperymentalnie, za każdym razem otwierając nowe możliwości i znajdując nowe zastosowania. Dwie najnowsze generacje zaobserwowane w XXI wieku, obejmujące fazy takie jak nematyk twist-bend (N_{TB}), nematyk splay (N_S) i nematyk ferroelektryczny (N_F), są przedmiotem trwającej debaty naukowej. Podczas gdy nowe klasy cząsteczek, które je tworzą, są syntetyzowane przez eksperymentatorów, teoretycy dyskutują nad czynnikami molekularnymi, które je stabilizują. Greco i Ferrarini [2015 *Phys. Rev. Lett.* **115**(14) 147801] wykazały, że oddziaływania czysto entropowe wystarczają do promowania modulacji typu twist-bend w systemach bent-core, co zostało później potwierdzone przez kolejne badania komputerowe. Z drugiej strony, pochodzenie N_S i N_F wciąż jest dyskutowane. Dwoma najważniejszymi czynnikami wydają się być stożkowaty kształt i duży moment dipolowy cząsteczki.

Niniejsza praca doktorska, obejmująca cząsteczki o wyłącznie twardych oddziaływaniach, poprzez symulacje Monte Carlo, ma na celu poszerzenie zrozumienia efektu kształtu w układach N_{TB} i określenie ich stabilności przy różnicowaniu parametrów, oraz ocenę możliwości uzyskania faz N_S i N_F bez pomocy oddziaływań dipolowych. Stwierdzono, że faza N_{TB} jest stosunkowo odporna na modyfikacje kształtu cząsteczek. Z drugiej strony, w układach stożkowych z wyłącznie twardymi oddziaływaniami, długozasiegową polaryzację i porządek typu splay zaobserwowano dopiero dla faz krystalicznych, podczas gdy dla cieczy było one najwyżej lokalne. Praca opiera się na pięciu artykułach naukowych, spośród których cztery zostały już opublikowane. Przed zaprezentowaniem ich krótkiego podsumowania, przedstawia teoretyczne podstawy postawionych zagadnień, oraz omawia techniki symulacyjne i oryginalny pakiet symulacyjny RAMPACK, który był rozwijany przez ostatnie cztery lata.