

Název: Nukleace v komplexních systémech

Autor: Jan Kulveit

Pracoviště: Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

Vedoucí práce: prof. Pavel Demo, Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Oddělení optických materiálů

Abstrakt: V této práci studujeme nukleaci v postupně abstraktnějších kontextech a systémech, počínaje klasickou teorií nukleace a konče nukleací v komplexních sítích. Mezi studované případy patří nukleace nečistot v pevné matici na několika krystalech alkalických halogenidů, kde jsme stanovili formační energie pro klastry, počínaje jednoduchým dipólem bez nečistot a malými agregáty až po možné konfigurace větších shluků. V další části se zaměříme na studium heterogenní nukleace. Zatímco v obvyklých modelech heterogenní nukleace se předpokládá, že povrchová energie je homogenní, ptáme se, co se stane, pokud budeme považovat povrchovou energii za heterogenní. S pomocí umbrella sampling zjišťujeme, že nukleační bariéra může být výrazně snížena v případě že povrch je heterogenní, i když je průměrná povrchová energie konstantní. V poslední části studujeme vliv koeficientu clusterování na fázové přechody v komplexních sítích pomocí FFS.

Klíčová slova: nukleace, komplexní systémy, fázové přechody, Isingův model, komplexní sítě