

Symulacje numeryczne morfologii warstw pasywnych na powierzchniach elektrod metalicznych

Streszczenie rozprawy doktorskiej

Autor: mgr Jan Bogusław Stępień

Promotor: dr hab. Janusz Stafiej, prof. UKSW

Tematem tej pracy jest samoorganizacja czasowo-przestrzenna w układach złożonych i dalekich od równowagi. Przykładem, na którym opiera się rozprawa, jest elektroda metalowa pasywująca się w roztworze elektrolitu. Rozważam warunki stałego napięcia – potencjostatyczne, oraz stałego natężenia prądu – galwanostaticzne. Proces pasywacji opisuję prostym modelem typu stochastycznego automatu komórkowego. Ten model badam używając symulacji komputerowych na procesorach graficznych.

Na podstawie wyników symulacji uzasadniam tezę, że model przewiduje występowanie zjawisk samoorganizacji czasowo-przestrzennej podobnych do obserwowanych w doświadczeniach. Zjawiska te obejmują oscylacje potencjału elektrody oraz natężenia prądu, a także cykliczne zmiany morfologii powierzchni towarzyszące oscylacjom.

Najważniejszą zaletą modelu jest to, że umożliwia śledzenie zmian powierzchni elektrody w trzech wymiarach w trakcie zachodzącego procesu. Inne metody modelowania, w tym układy równań różniczkowych, dają tę możliwość w bardzo ograniczonym stopniu. Również w doświadczeniach, śledzenie ewolucji powierzchni *in situ* napotyka duże trudności.

Motywacją moich badań jest następująca: Po pierwsze, symulacje pomogą lepiej zrozumieć fizyczne, mikroskopowe podstawy korozji i pasywacji metali. Po drugie, dążę do poszerzenia wiedzy o tym, jak proste układy dyskretnie generują złożone, nieliniowe zachowania. I po trzecie, badania nad symulacją samoorganizacji mogą mieć wpływ na inżynierię nanomateriałów. Być może, stosując odpowiednią regulację prądu lub potencjału, będziemy w stanie tworzyć powierzchnie o żądanych właściwościach, w tym adsorpcyjnych lub katalitycznych.

Rozdział 1 – *Wprowadzenie* – omawia automaty komórkowe, ich historię i zastosowania. Następnie znajduje się rys historyczny badań teoretycznych nad wzrostem powierzchniowym i wzrostem warstw. Przytoczone są modele oparte na równaniach kinetycznych oraz modele dyskretnie – automaty komórkowe. Dalej znajduje się wstęp do dynamiki nieliniowej, w zastosowaniu do samoorganizacji w chemii. Rozdział ten kończy się omówieniem celów pracy.

Rozdział 2 – *Model Wzrostu Warstwy Pasywnej* – zawiera dokładny opis automatu komórkowego używanego przeze mnie jako modelu pasywacji metali.

Rozdział 3 – *Symulacje i Omówienie Wyników* – opisuje przeprowadzone symulacje, rodzaj zbieranych danych i przedstawia najważniejsze wyniki: oscylacje potencjału i natężenia prądu oraz zmiany struktury powierzchni towarzyszące tym oscylacjom.

Rozdział 4 – *Podsumowanie* – zawiera skrótowe powtórzenie najważniejszych wniosków oraz omówienie potencjalnych kierunków przyszłych badań.

Rozprawę zamyka spis literatury.

Warszawa, 8 lutego 2021