

UNIVERZITA KOMENSKÉHO

# Abstrakt

Fakulta matematiky, fyziky a informatiky  
Katedra experimentálnej fyziky

Doktor filozofie

## Skúmanie tlakom indukovanej polymerizácie v kryštáloch pozostávajúcich z jednoduchých molekúl pomocou *ab initio* výpočtových metód

autor: Mgr. Ondrej TÓTH

Systemy pozostávajúce z jednoduchých molekúl sú takmer storočie oblasťou záujmu fyziky vysokých tlakov. Svoje uplatnenie nájdu v priemysle, ale veľa vypovedajú aj o pôvode a zložení planét a ich povrchu. V tejto práci sa zameriame na dva molekulárne systémy, oxid siričitý  $\text{SO}_2$  a sírouhlík  $\text{CS}_2$ , pre ktoré sme pozorovali odlišné správanie pod tlakom.  $\text{SO}_2$  podlieha tlakovo-indukovanej amorfizácii a vratnej štruktúrnej transformácii medzi dvomi amorfnými fázami pri 26 GPa, ktoré sme pozorovali v *ab initio* aj machine-learned potenciál molekulovej dynamike. Výsledky sú konzistentné s dátami z Ramanovskej spektroskopie a diamond anvil cell Röntgenovými difrakčnými experimentami získanými našimi kolegami. Štruktúrna zmena prebieha polymerizovaním  $\text{SO}_2$  molekúl s násobnými väzbami do retiazok s troj-koordinovanými sírovými atómami pospájanými kyslíkovými atómami.  $\text{CS}_2$  predstavuje dlho študovaný systém s tendenciou chemicky dekomponovať. Vyrátili sme zaužívanú predstavu o vývoji štruktúry  $\text{CS}_2$  s tlakom a ukázali, že okolo 10-11 GPa polymerizuje do neusporiadanej štruktúry s troj- (C3) a štvor-koordinovaným (C4) uhlíkom. Následná kompresia vedie na zvyšovanie koordinácie a rast C4/C3 pomeru, čo je čiastočne reverzibilný proces po dekompresii. Ďalej diskutujeme ako vysvetliť dvojité C=C väzby bez chemickej dekompozície vzorky. Všetky výsledky zo simulácií sú konzistentné s prezentovanými experimentálnymi dátami z Raman a IR spektroskopie ako aj s diamond anvil cell Röntgenovou difrakciou.