

Többkomponensű folyadékok szerkezetvizsgálata multi forcefield módszerrel

PETHES ILDIKÓ

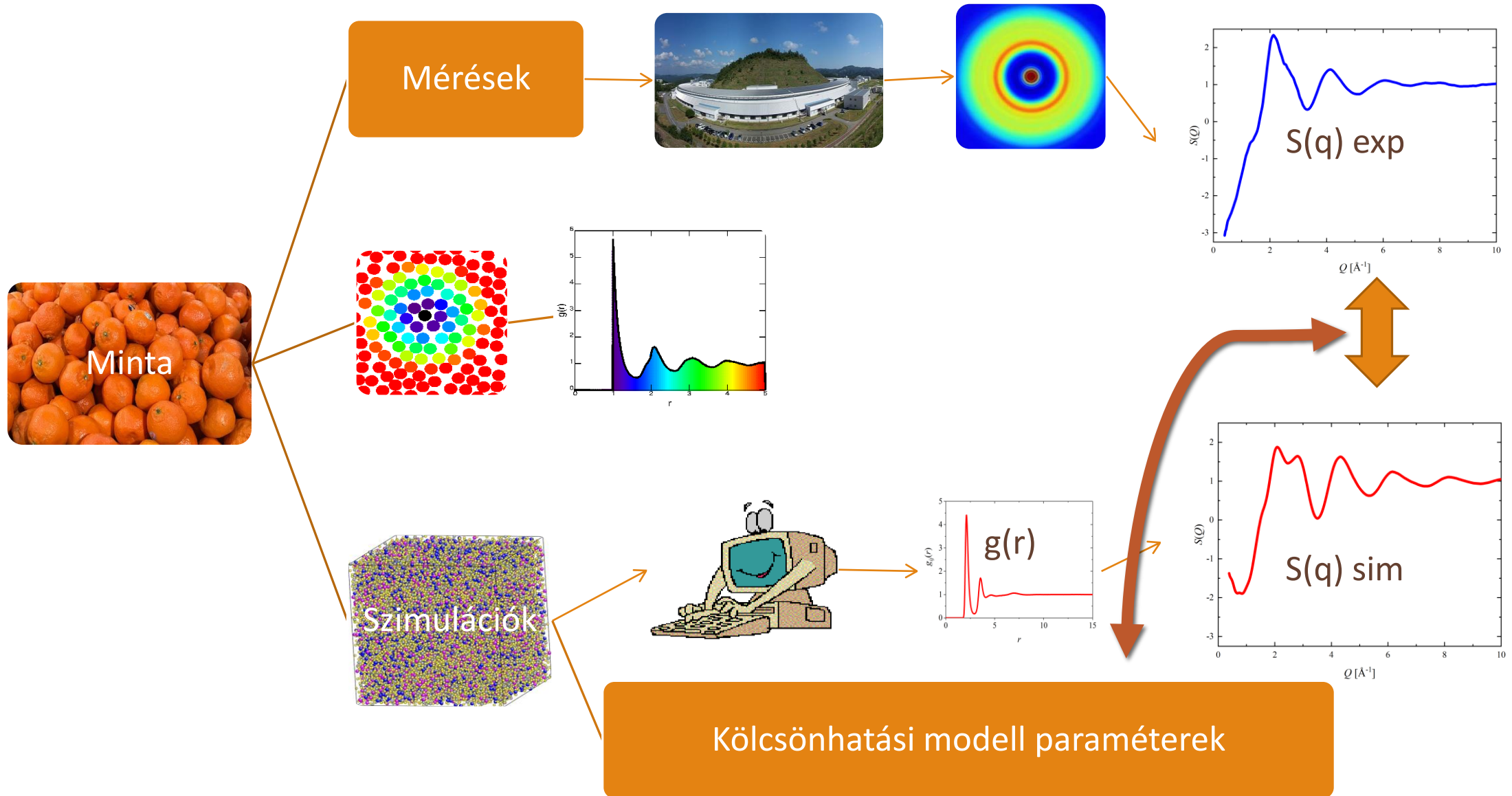
HUN-REN WIGNER FIZIKAI
KUTATÓKÖZPONT

FOLYADÉKSZERKEZET
KUTATÓCSOPORT

HUN
REN



Folyadékok atomi szintű szerkezetvizsgálata



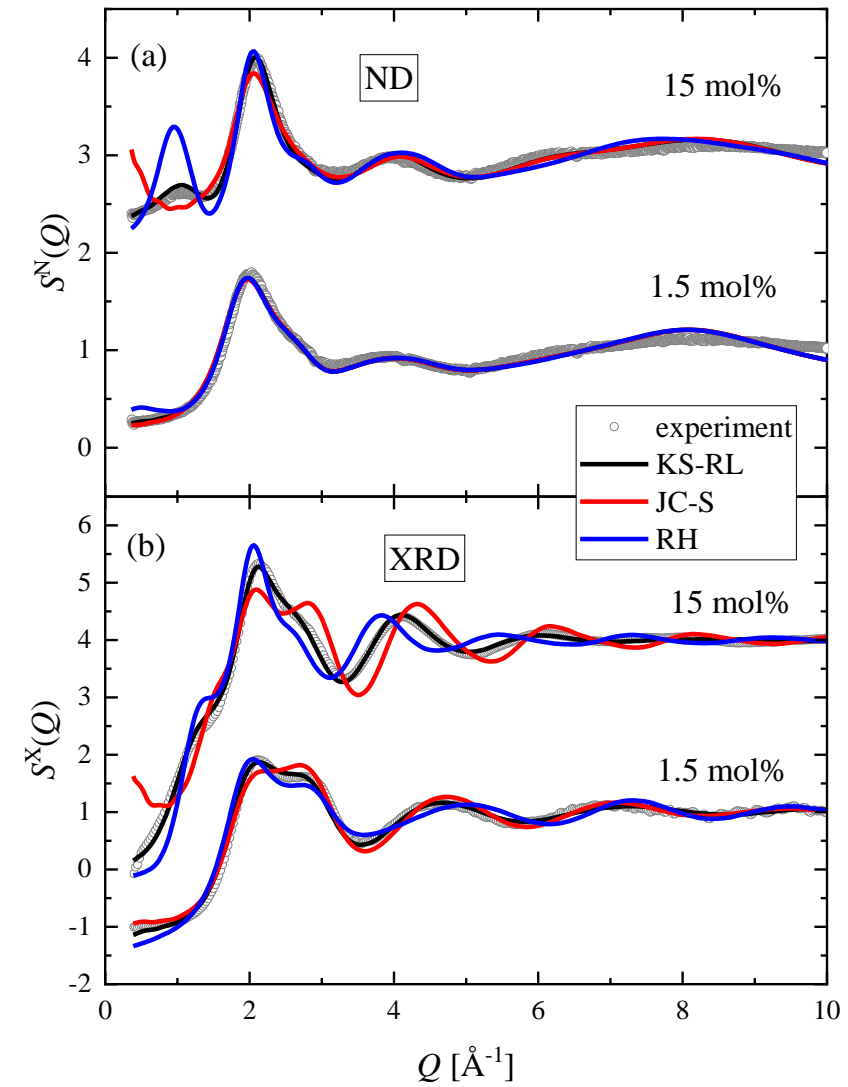
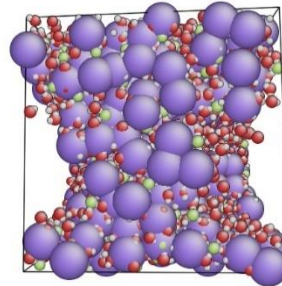
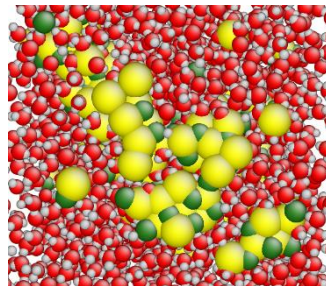
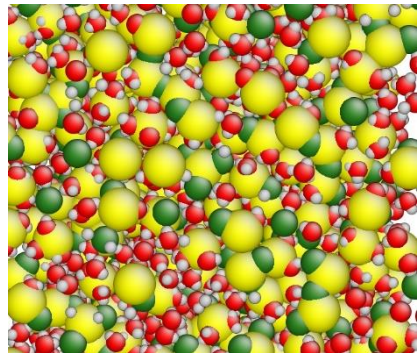
Sóoldatok

4 atomtípus (anion, kation, víz O, víz H) → 10 féle pár

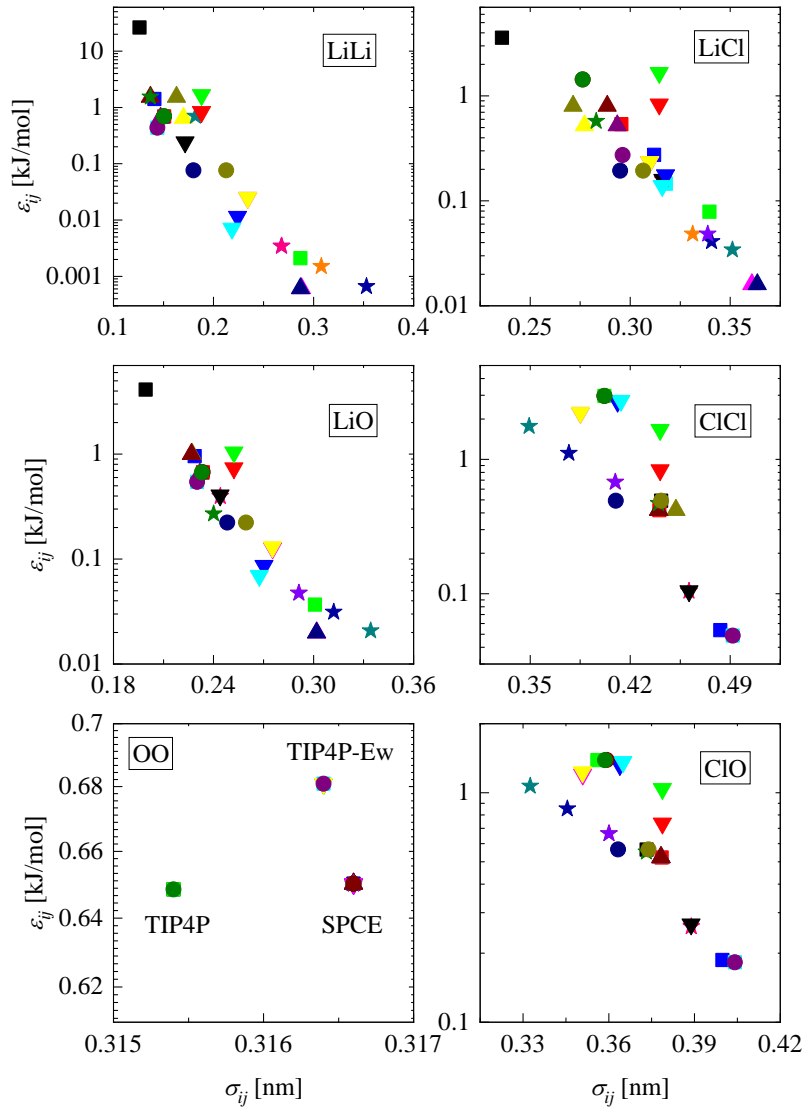
Kölcsönhatási potenciál: 12-6 Lennard-Jones:
2 paraméter/atomtípus + kombinációs szabály

Számos potenciál modell az irodalomban,
véletlenszerű választás, vagy...?

Eltérő eredmények: komplett kudarcról a
kielégítő illeszkedésig



Példa: LiCl-vizes oldatai



29 potenciálmodell

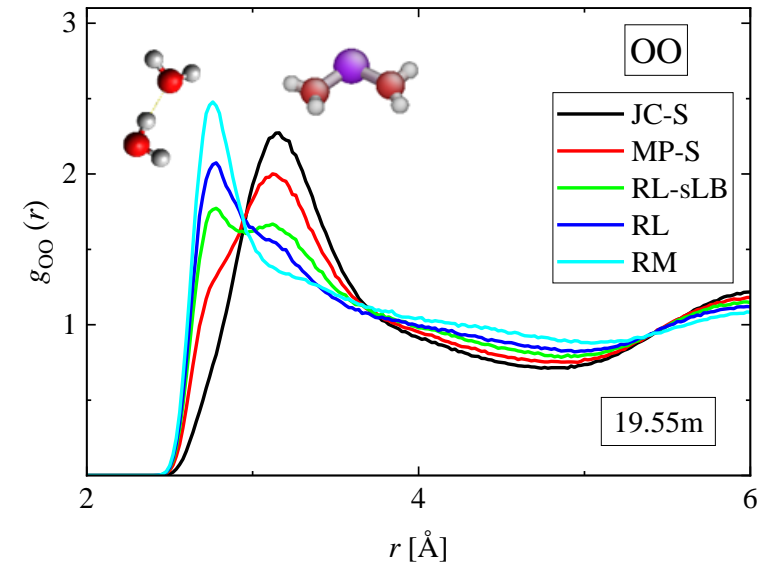
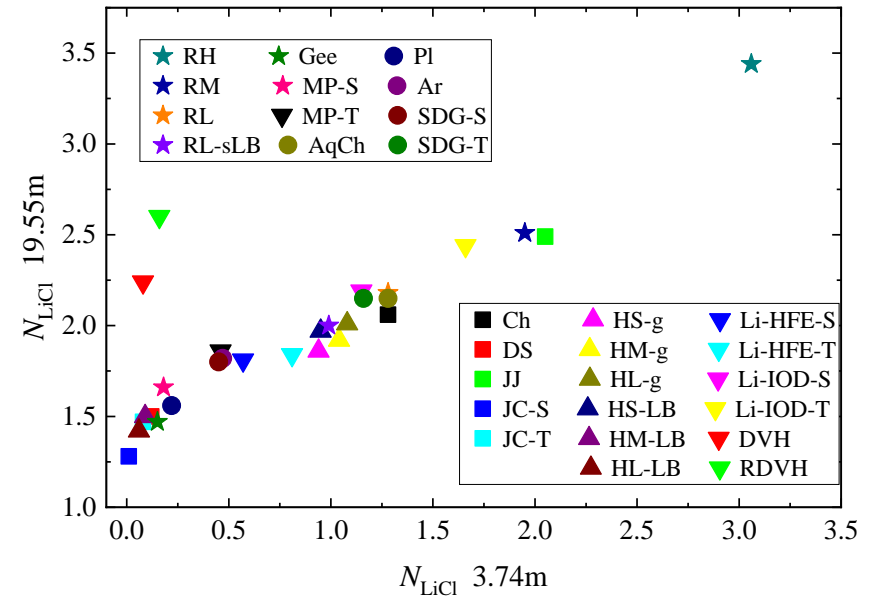
- Paraméterei széles tartományban

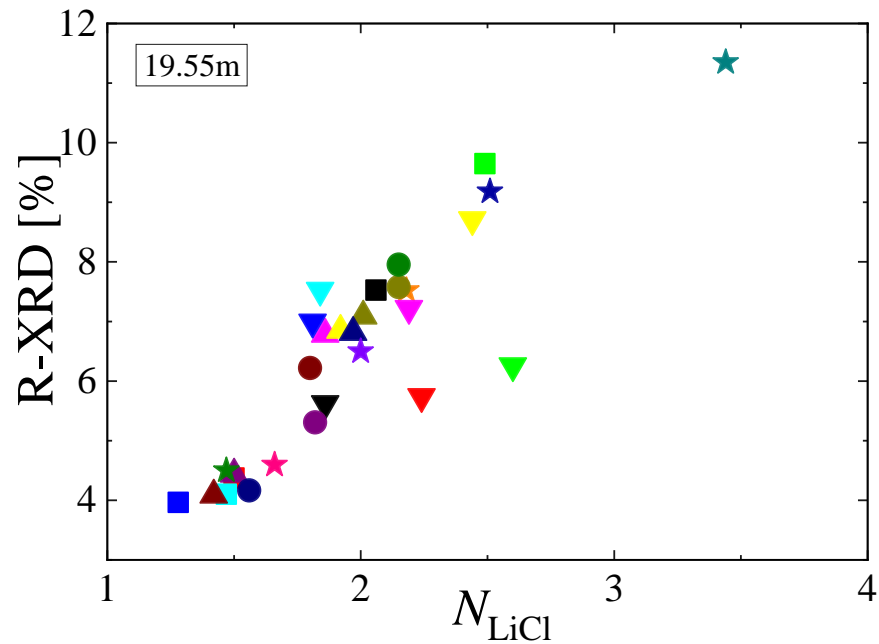
Különbségek:

- Kötéstávolságok
- Kontakt ion párok száma 1. Hidrátszférában levő vízmolekulák száma
- H-kötött vízpárok száma

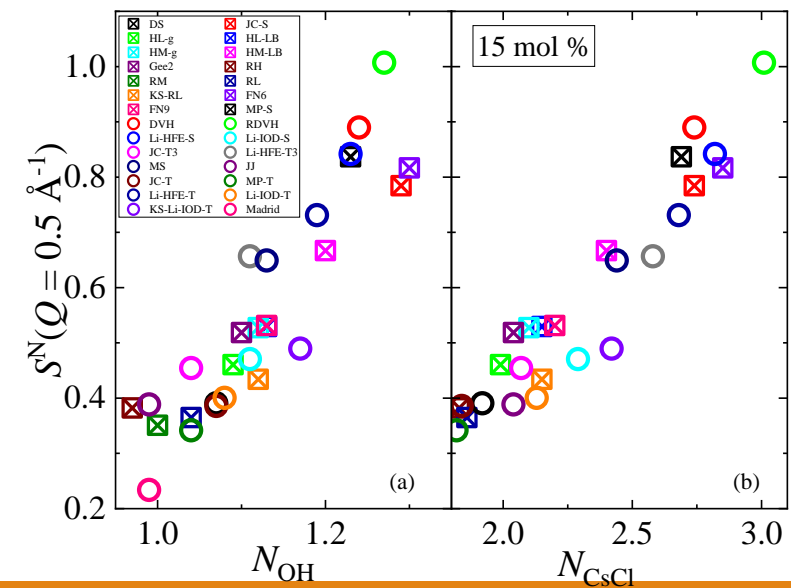
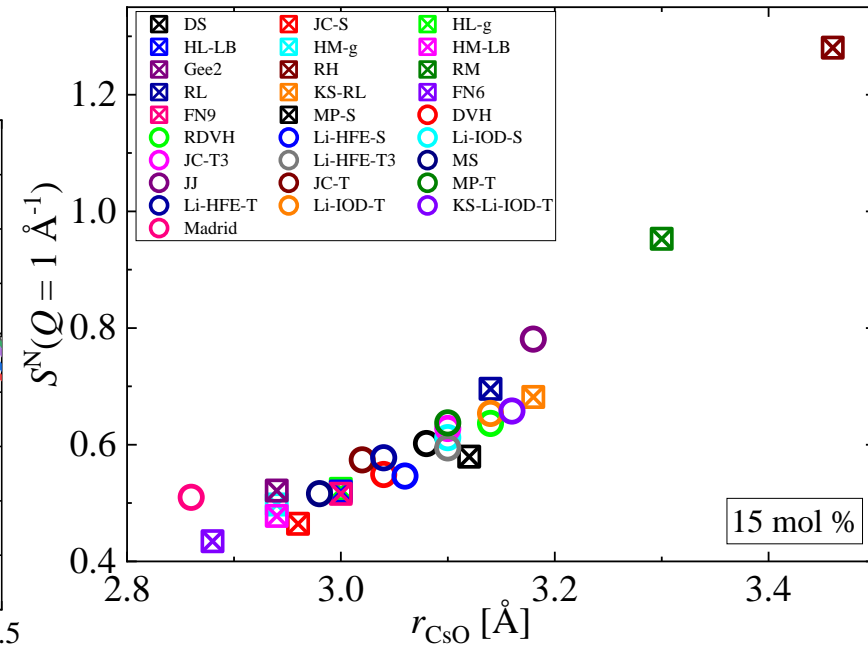
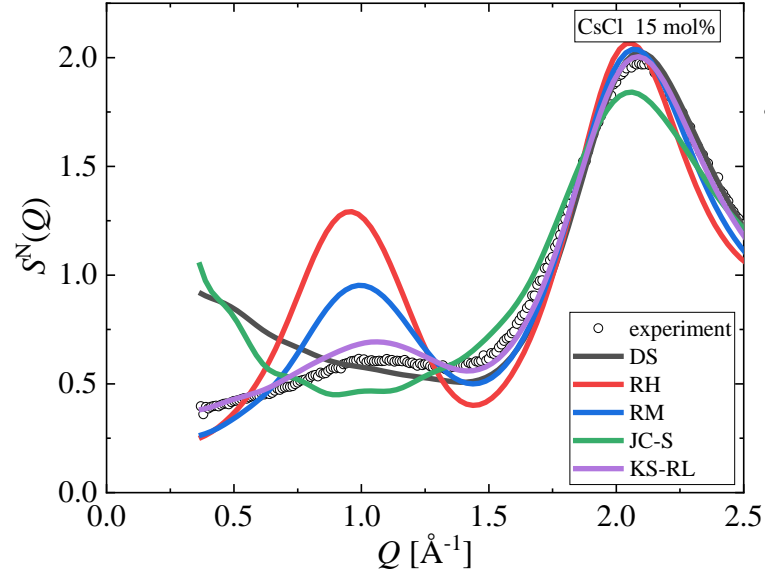
Hasonlóságok:

- Ionok és vízmolekulák teljes koordináltsága





Kiértékelés



Kiértékelés

- kísérleti adattal összevetés

Van kielégítő illeszkedés

- eredmények az adott modelltől

Nincs kielégítő illeszkedés

- tendenciák
- Jobb/rosszabb modellek

Folytatás: gépi tanulással?