



Contribution ID: 120

Type: Előadás

Folyadékok szerkezetvizsgálata diffrakciós kísérletek és számítógépes szimulációk kombinációjával

Friday 23 August 2013 09:00 (30 minutes)

A folyadékok (és az amorf anyagok) rendezetlen szerkezetének felderítése még az egyetlen kémiai elemet tartalmazó rendszerekben (pl. a fémolvadékok) sem magától értetődő feladat: a diffrakciós kísérlet csak a kéttest-korrelációkról szolgáltat információt. A sokszor problémás kiértékelést követően kapott radiális eloszlásfüggvény, $g(r)$, már a legegyszerűbb többreszcse-korrelációkról (mint pl. a szögeloszlások) sem ad képet: ezért szükségesek a közvetlenül a mérési adatok alapján szerkezeti modelleket előállító számítógépes módszerek. Az egyik ilyen szimulációs eljárás az ún. Reverse Monte Carlo (RMC) modellezés [1], melynek eredményeképpen a röntgen- és neutrontdiffrakciós, valamint EXAFS kísérleti adatokkal konzisztens, több (tíz) ezer atomot tartalmazó részecske-konfigurációk nyerhetők. Az előadás az RMC módszer legújabb változatát, a kölcsönhatási potenciálokat is alkalmazó RMC_POT eljárást [2], valamint ennek (megvalósult és lehetséges jövőbeni) alkalmazásait ismerteti a molekuláris folyadékok (mint pl. a víz és vizes oldatok) körében.

[1] R.L. McGreevy, L. Pusztai, *Molecular Simulation* 1 (1988) 359.

[2] O. Gereben, L. Pusztai, *J. Computational Chemistry* 33 (2012) 2285.

Author: PUSZTAI, László (MTA Wigner FK, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet, 1121 Budapest, Konkoly Thege út 29-33.)

Presenter: PUSZTAI, László (MTA Wigner FK, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet, 1121 Budapest, Konkoly Thege út 29-33.)

Session Classification: Diffrakció

Track Classification: Diffrakció