

Anotace přednášky

VLASNOSTI A STRUKTURA TAVENIN – ATOMISTICKÉ SIMULACE

*Ondrej Gedeon, Jan Macháček
Ústav skla a keramiky, VŠCHT Praha*

Ve své první části příspěvek seznámí s možnostmi molekulové dynamiky (MD) a pokusí se je konfrontovat s experimentem. Shrnou se základní principy klasické MD a kvantové MD, založené na minimalizaci Hamiltoniánu jako funkcionálu elektronové hustoty. Upozorní se na artefakty výpočtů a jejich vztah ke spolehlivosti a realističnosti výsledků. Výsledky simulací budou demonstrovány na několika skelných systémech: $\text{Na}_2\text{O-CaO-SiO}_2$, $15\text{K}_2\text{O}.85\text{SiO}_2$ a tavenině $\text{Na}_2\text{O-CaO-SiO}_2$.

V další části příspěvku bude presentována jednoduchá analýza vibračních spekter. Vibrační spektroskopie jsou strukturně citlivé metody, které se často používají při studiu skla. Interpretace jejich spekter je však právě díky nekrystalickému charakteru skla velice složitá. Zde budou presentovány výsledky získané rozkladem spektra na symetrizované vibrační módy.

Výsledky klasické MD se použily k vytvoření a zoptimalizování výpočtu objemového a střižného modulu skelných systémů. Pomocí kvantové MD bylo připraveno sklo $15\text{K}_2\text{O}.85\text{SiO}_2$. Po iontová optimalizaci systému, odebrání draselných kationů ze struktury a následné iontová optimalizaci se opět analyzovala struktura. Bylo zjištěno, že nemůstkové kyslíky vytvořili v této, o alkálie ochuzené struktuře, peroxidové vazby. V dalším kroku byla zvýšena teplota a sledována strukturní relaxace. Ta spočívala v eliminaci molekulárního kyslíku, který se uvolnil z peroxidových vazeb několika stupňovým procesem přes pětikoordinované transitní stavy křemíku a nestálé ozonidové struktury.