

Povzetek

Z Ornstein-Zernikovo integralsko enačbo in simulacijami Monte Carlo smo proučevali vodi podoben izotropen model, ki ima v parskem potencialu dve karakteristični razdalji. Ocenili smo konvergenčni radij pri uporabi različnih zvez (Percus-Yevick, HNC, Kovalenko-Hirata, Rogers-Young, SMSA) v integralskih enačbah, nato pa smo določili njihovo pravilnost v primerjavi s podatki iz simulacij. Največje konvergenčno območje ima zveza Kovalenko-Hirata, medtem ko je Rogers-Youngova zveza zaradi zahtevane termodinamične konsistentnosti najpriljubljenejša. Analitično in iz simulacij smo določili kritični točki. Poleg običajne kritične točke plinasto-tekoče smo pri visokem tlaku tik nad temperaturo tališča odkrili drugo kritično točko tekoče-tekoče, ki zamejuje območje, v katerem soobstajata dve različni tekoči fazi. Izračunali smo termodinamične lastnosti vodi podobnega modela in pokazali, da dobro opiše anomalije, ki so značilne za vodo, npr. temperaturo največje gostote in minimuma specifične toplote. Hidratacijo nepolarnih topljencev smo modelirali z vstavljanjem Lennard-Jonesovih delcev različnih velikosti in afinitete do topila; opazili smo tipične značilnosti hidrofobnega efekta. V nadaljevanju smo model razširili na metanol. Analitično smo ga obravnavali z integralskimi enačbami RISM, ki smo jih primerjali s podatki iz simulacij. Fazni diagram modela metanola prav tako vsebuje dve kritični točki. Iz eksperimentalnih podatkov za dolžino in jakost vodikove vezi v vodi in metanolu smo z ekstrapolacijo podatkov iz simulacij ocenili natančen položaj kritične točke tekoče-tekoče v realnem metanolu. Termodinamika modelnega metanola kaže manj anomalnih lastnosti kot voda, kar je v skladu z eksperimentalnimi trendi. Ker raztopine metanola v vodi izkazujejo izrazito neidealnost, smo preverili napovedi modela za presežni prostornino in entalpijo mešanja ter ugotovili dobro posnemanje eksperimentalnih rezultatov.

Ključne besede: molekulske simulacije, anomalne lastnosti, voda in metanol, izotropni modeli, kritična točka tekoče-tekoče