

Povzetek

Preprost dvodimenzionalni model smo uporabili za opis (anomalnih) lastnosti vode. Prednosti takega modela so predvsem večja računsko učinkovitost, enostavna vizualizacija sistema ter primernost za uporabo v statističnomehanskih teorijah. Uporabili smo vrtnični model ter Mercedes-Benz model, pri katerem so molekule modelirane kot Lennard-Jonesovi diski z eksplicitnim orientacijsko-odvisnim potencialom za vodikove vezi. Cilj raziskave je bil preučiti lastnosti vrtničnega modela v različnih sistemih, poleg tega pa razviti pristope, ki nam omogočajo čim hitrejši izračun lastnosti (tekoče) vode. S simulacijami smo določili območja anomalnih lastnosti vrtničnega modela ter jih razvrstili v hierarhijo. Ta hierarhija je nekoliko drugačna kot pri pravi vodi in je odvisna od parametrizacije modela. Pomembna anomalna lastnost vode je tudi njeno pestro fazno obnašanje. S termodinamično perturbacijsko teorijo smo določil ravnotežno krivuljo tekočina-para ter perkolacijsko krivuljo. Nekoliko več faznih prehodov smo uspeli določiti z algoritmom gnezdenega vzorčenja. Ker pa smo hoteli fazni diagram določiti na čim bolj enostaven način, smo razvili pristop, ki z uporabo metod nenadzorovanega strojnega učenja praktično avtomatsko določi celoten fazni diagram modela vode. S simulacijami molekulske dinamike smo preučili obnašanje vrtničnega modela vode v statičnem in časovno odvisnem električnem polju. V močnem polju molekule vode izgubijo vse značilnosti vode in se obnašajo kot dipoli v električnem polju. Če je jakost polja približno enaka jakosti vodikovih vezi, pa postanejo anomalne lastnosti vode bolj izrazite. Razvili smo model, ki opiše frekvenčni odziv vode na časovno odvisno električno polje glede na statistiko vodikovih vezi. Razvili smo tudi strukturni model vode, ki temelji na analitičnem modelu vode. Model generira snežinkam podobne strukture, ki služijo kot približek strukture tekoče vode. Analitičen model smo s tem razvili v kompleten model, ki omogoča izračun termodinamičnih, dinamičnih in strukturnih lastnosti vode.

Ključne besede: model vode, vrtnični model, Mercedes-Benz model, statistična mehanika, statistična termodinamika, fazni diagram, električno polje, analitični model