

FIZYKOCHEMIA MATERIAŁÓW TWORZĄCYCH FAZĘ SZKLISTĄ

Symulacje komputerowe dynamiki molekularnej – nowoczesna i niezastąpiona metoda badania materii skondensowanej

dr Kajetan Koperwas
7.12.2017

Na przestrzeni ostatnich dekad wiedza na temat gęstych układów jakimi są ciecze przechłodziła została znacznie wzbogacona, a to za sprawą powstania, nie tylko nowoczesnej aparatury badawczej, ale również komputerów o ogromnej mocy obliczeniowej, które to zainicjowały wdrożenie nowych, dotąd niedostępnych metod badania materii. Jedną z nich są symulacje komputerowe dynamiki molekularnej, które stanowią pomost pomiędzy przewidywaniami teoretycznymi analiz a wynikami eksperymentalnych badań substancji rzeczywistych. Jest to osiągalne dzięki niedostępnej w rzeczywistych eksperymentach możliwości bezpośredniej ingerencji w potencjał oddziaływań umożliwiającej precyzyjną jego modyfikację – zgodnie z ustalonymi założeniami. Warto również zaznaczyć, iż symulacje komputerowe dynamiki molekularnej umożliwiają oszacowanie wielkości fizycznych, których eksperymentalnie wyznaczenie jest niezwykle wymagającym zadaniem np. wartości swobodnej energii płaszczyzny oddzielającej fazę krystaliczną od ciekłej, dzięki czemu są one idealnym uzupełnieniem doświadczalnych badań materii. Nie dziwi zatem fakt, iż symulacje komputerowe dynamiki molekularnej, pomimo swojej relatywnie krótkiej historii, już teraz stały się nieodłączną częścią współczesnej fizyki materii skondensowanej.