

# Molekuláris dinamika: kísérleti potenciálfelületek

## A potenciálokról

- kísérleti és elméleti meghatározási módszerek
- kísérleti:
  - spektroszkópiai módszerek (potenciál gödör környékéről adunk infót! Kiterjesztés: emisszió disszociatív gerjesztett állapotból)
  - molekulanyaláb kísérletek
- elméleti: kvantumkémiai számítások

## Kísérleti megfontolások:

- kezdetben: ütközési hatáskeresztmetszet sebesség függése alapján → taszító rész vizsgálata (magas energiák – nemesgázokra, inert molekulákra)
- később: kis energiájú ütközések → vonzó rész
- legtöbb információ → szögeloszlás vizsgálata ( $I(\Theta)$ - $\Theta$  fv.)

## Példák

### -Atom-atom ütközés

### Nemesgáz potenciálok:

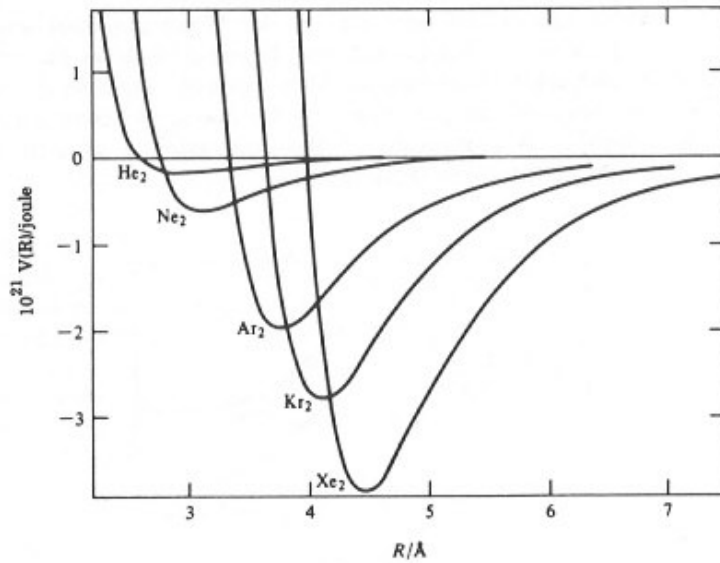


Fig. 3.16. Potential energy curves  $V(R)$  for homonuclear rare-gas dimers derived from experiments on the elastic scattering of crossed beams of rare gases. [Adapted from J. M. Farrar, T. P. Schafer, and Y. T. Lee, in *Transport Phenomena*, A.I.P. Conference Proceedings, No. 11 (1973), J. Kestin, ed.]

## Megfelelő állapotok tételének illusztrációja

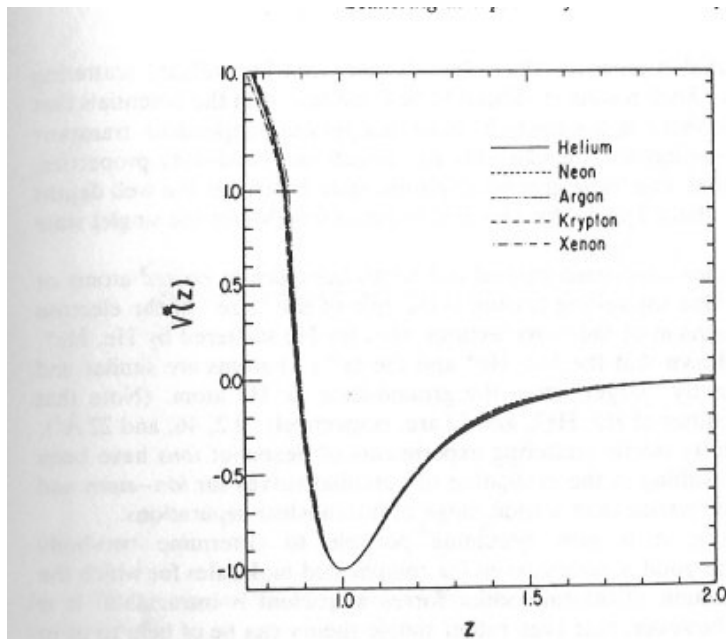


Fig. 3.17. "Reduced" potentials for homonuclear rare-gas pairs. Here the reduced potential  $V^* = V/\epsilon$  is plotted versus the reduced separation  $z = R/R_e$ ,  $\epsilon$  and  $R_e$  are the well depth and separation at the minimum of the potential. (Same source as in Fig. 3.16.) For a thorough review, see Maitland et al. (1981).



gázok azonos redukált nyomást fejtenek ki, ha a redukált tf. és redukált  $T$  azonos

$$p^* = \frac{p}{p_c} \quad V^* = \frac{V_m}{V_c} \quad T^* = \frac{T}{T_c}$$



⇐ megfelelő állapotok tétele

$$\left( z = \frac{R}{R_e}, \quad V^* = \frac{V}{\epsilon} \right)$$



Második viriál tényező hőmérsékletfüggése szinte azonos rájuk! (redukált alakjában!)

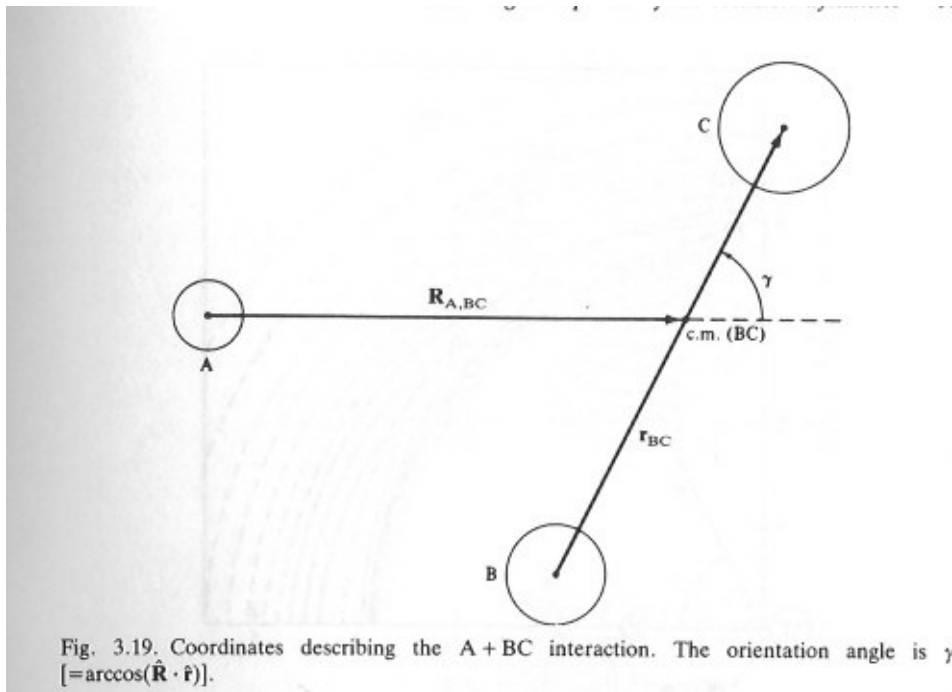
- atom – gerjesztett atom ütközés

→ elektronfelhő mérete He-He He-He\*, He-Li  $\sigma(v)$  méréséből

- molekula – atom ütközés:

→ már a belső struktúrát is figyelembe kell venni.

→ próbálkozások: potenciál felírható:  $r$ -függő és  $\gamma$ -függő (orientáció) rész szorzat



→ rugalmas és reaktív ütközések közti átmenet:  
rugalmatlan ütközések → energiamegmaradás →  
belső szabadsági fokra jut!

→ csatolás kell, hogy legyen  $R$  és  $r$  között ( $R$ : relatív koordináta,  $r$ : belső koordináta, lehet rotációt leíró szög is!)

→ Csatolás:  $R$  változásával  $r$ -ben jön létre változás, erő hat  $r$ -re  $R$  mozgása által ⇒ Azaz van egy olyan

potenciál ami  $R$ -től és  $r$ -től is függ  $V(R, r) \Rightarrow$  Pld.  $R$  függő,  $\gamma$  függő részeken kifejtett potenciálok –  $A+BC$  ütközésre!

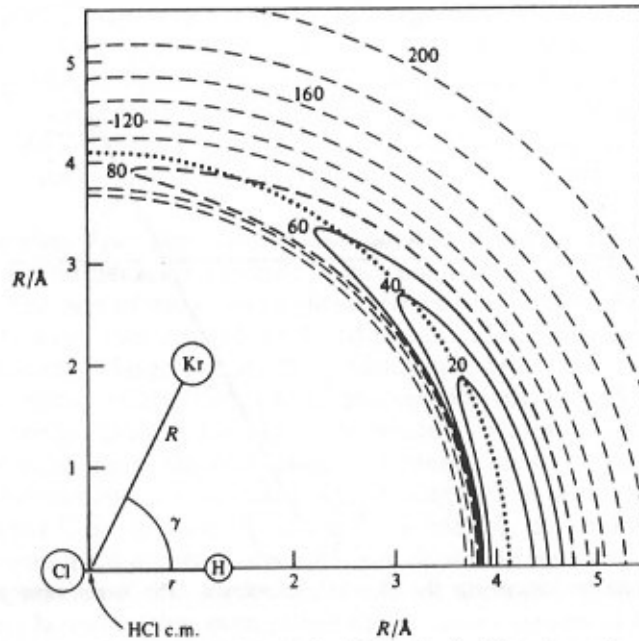


Fig. 3.20. Polar plot of the potential for the Kr-HCl molecule. Energies are in  $\text{cm}^{-1}$  relative to the minimum at  $\gamma = 0$ . [Adapted from J. M. Hutson, A. E. Barton, P. R. Langridge-Smith, and B. J. Howard, *Chem. Phys. Lett.*, 73, 218 (1980).]