

Výpočet pohyblivosti iónov metódami molekulovej dynamiky

J. Matúška, J. Urban

matuska@neon.dpp.fmph.uniba.sk

Určenie pohyblivosti iónov je nevyhnutné pre správnu analýzu výsledkov z iónového pohyblivostného spektrometra (IMS). Na výpočet pohyblivosti vybraných iónov sme použili počítačový model založený na molekulovej dynamike. Implementácia počítačového modelu sa uskutočnila v programe DL_Poly 3.09 (DL_poly). Medzi výstupnými dátami programu DL_poly je aj koeficient difúzie pre jednotlivé atómy v študovanom systéme. Výpočtom s použitím Einsteinovho vzťahu sme z koeficientu difúzie získali pohyblivosť. Pohyblivosť daných iónov sme určili pre viacej typov forcefieldov, aby sa zistila ich vhodnosť pre náš daný problém. Určovali sme pohyblivosti iónov NO₂⁻ a NO₃⁻ v dusíku. Vypočítané výsledky sme porovnali s dátami nameranými na Katedre experimentálnej fyziky.