

# Abstrakt

<b>Autor:</b>	Mgr. Dominika Melicherová
<b>Názov:</b>	Štúdium polymerizácie dusíka pri vysokom tlaku pomocou molekulovej dynamiky
<b>Univerzita:</b>	Univerzita Komenského v Bratislave
<b>Fakulta:</b>	Fakulta matematiky, fyziky a informatiky
<b>Katedra:</b>	Katedra experimentálnej fyziky
<b>Školiteľ:</b>	Prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc.
<b>Mesto:</b>	Bratislava
<b>Dátum:</b>	3.7.2023
<b>Počet strán:</b>	80
<b>Typ práce:</b>	Dizertačná práca

Fázový prechod v kvapaline predstavuje nezvyčajný jav, ktorý stále nie je úplne pochopený. Experimentálne bol potvrdený pre jediný prvok, fosfor. Existencia fázového prechodu prvého druhu medzi molekulárnou a polymerickou kvapalinou bola pozorovaná v dusíku, ale hodnota tlaku prechodu pozorovaného v experimente a v simuláciách sa nezhoduje. Podobná nezhoda medzi experimentom a simuláciou je prítomná aj v tuhom stave. Vykonali sme simulácie *ab initio* molekulovej dynamicky pri teplote 3000 K a tlakoch od 100 do 125 GPa s použitím SCAN funkcionálu a kvôli zredukovaniu efektov konečnej veľkosti simulovaného systému sme použili simulačné bunky s 192 a 288-atómami. Uskutočnili sme kompresiu a aj dekompresiu, pričom prechod sme pozorovali medzi tlakmi 110 a 115 GPa, čo je hodnota bližšie experimentálnym výsledkom. Okrem toho sme urobili aj simulácie molekulovej dynamiky molekulárneho a polymerického kryštálu blízko krivky topenia, vďaka čomu sme zistili, že molekulárny kryštál má veľkú orientačnú a translačnú neusporiadanosť molekúl, teda je pravdepodobne plastickou fázou s vysokou entropiou. Vysoká entropia stabilizuje molekulárnu fázu pri vysokých tlakoch a vysokých teplotách. Avšak, *ab initio* molekulová dynamika je mimoriadne výpočtovo náročná,

obzvlášť v prípade kvapalín, kde sú potrebné veľké simulačné bunky. Preto sme pre kvapalný dusík natrénovali potenciál pomocou strojového učenia, ktorý by nám v budúcnosti umožnil preskúmať viaceré teploty a tak detailne vyšetriť fázové rozhranie kvapalina-kvapalina.

**KEÚČOVÉ SLOVÁ:** kvapalný dusík, fázový prechod kvapalina-kvapalina, molekulová dynamika, DFT, machine learning potenciály