MDspec: Durch Molekulardynamik zu Spektren georelevanter Fluide

Berechnete Schwingungsspektren erlauben Einblicke in die Struktur geologisch relevanter Fluide

***G. Spiekermann**, Institut für Geowissenschaften, Universität Potsdam*

Kurzgefasst

- Wichtige geologische Prozesse beruhen auf Fluiden
- Schwingungsspektren sind der Schlüssel zum Verständnis der Struktur dieser Stoffe.
- Im Rahmen des Projektes **MDspec** berechnete Schwingungsspektren helfen beim Verständnis experimenteller Spektren.

Das Projekt **MDspec** widmet sich Fluiden, die in der Geologie eine kaum zu unterschätzende Bedeutung für den Stofftransport haben. Sie sind beispielsweise verantwortlich für Vulkanismus und die Entstehung von Erzlagerstätten. Ziel der Forschung ist es, die Struktur von Fluiden zu bestimmen und den Zusammenhang zwischen makroskopischen Eigenschaften und der Struktur auf atomarer Ebene zu verstehen.

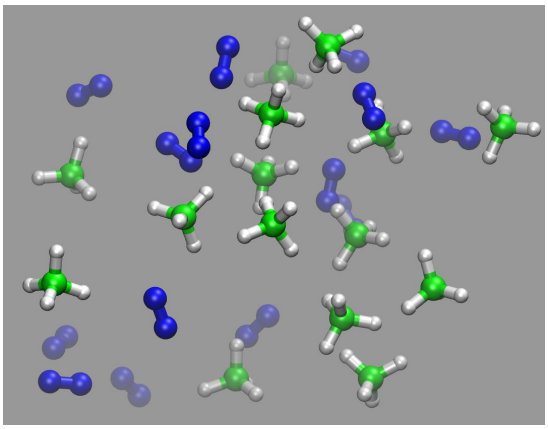

***Abbildung 1:** Schnappschuss aus der Molekulardynamik-Trajektorie eines Fluids im System CH_4-N_2. Ihre Schwingungseigenschaften können per Computer berechnet werden.*

Vor kurzem wurde experimentell ein Zusammenhang zwischen Veränderungen der Schwingungsfrequenzen und Veränderungen der Fugazität der einzelnen Komponenten in Gasen und Fluiden im System CH_4-N_2-CO_2 bei steigendem Druck nachgewiesen (Lamadrid et al. 2017). Die Ursache dieser Veränderungen liegt in der Veränderung der Struktur auf atomarer Ebene. Berechnungen der Struktur dieser Gase und Fluide mit Hilfe der ab initio Molekulardynamik sind ein ideales Werkzeug, um den Zusammenhang zwischen diesen Veränderungen zu untersuchen.

Weitere Informationen

[1] G. Spiekermann, M. Steele-MacInnis, C. Schmidt and S. Jahn *Journal of Chemical Physics* **136**, 154501 (2012).

[2] H.M. Lamadrid, M. Steele-MacInnis nad R.J. Bodnar *Journal of Raman Spectroscopy* **426**, 1-13 (2017).