

# Habilitációs pályázat

*Némethné Pethes Ildikó*



Folyadékszerkezet Kutatócsoport  
Komplex Folyadékok Osztály  
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

2023. augusztus 9.

## ***Szakmai önéletrajz***

*Név:* Némethné Pethes Ildikó

*Születési név:* Pethes Ildikó

*Születési hely, idő:* Budapest, 1971. október 6.

*Állampolgárság:* magyar

*Családi állapot:* férjezett, 5 gyermek édesanyja



e-mail: [pethes.ildiko@wigner.hu](mailto:pethes.ildiko@wigner.hu)

MTMT azonosító: 10026544

ORCID azonosító: 0000-0002-1931-1584

google scholar: [Google Scholar Profile](#)

### *Munkahelyek/pozíciók:*

- 2020 – Wigner posztdoktor/Tudományos munkatárs II., Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet, Komplex Folyadékok Osztály, Folyadékszerkezet Csoport
- 2014 – Tudományos munkatárs (posztdoktor), Wigner (korábban: MTA Wigner) Fizikai Kutatóközpont Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet, Komplex Folyadékok Osztály, Folyadékszerkezet Csoport
- 2004 – 2013: tudományos munkám szünetelt, GyED-en, GyES-en voltam, valamint az azóta megszűnt családi vállalkozás ügyvezetői és adminisztrációs feladatait láttam el
- 2001 – 2003: Tudományos munkatárs, MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet (SzFKI), Fémkutatási Osztály
- 1998 – 2000: Tudományos segédmunkatárs, MTA SzFKI, Fémkutatási Osztály

A PhD megszerzése óta tudományos kutatói munkakörben eltöltött idő 9 év.

### *Tanulmányok, végzettségek:*

- 2004.: PhD fokozat (Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BMGTE), Természettudományi Kar (TTK), Fizikai Tudományok Doktori Iskola, cum laude, disszertáció címe: Disszipáció  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  magashőmérsékletű szupravezetőben)
- 1998-2001.: PhD képzés (BMGTE TTK, Fizikai Tudományok Doktori Iskola, téma-vezető: Kriza György)
- 1990-1995.: fizikus szak, kitüntetéses oklevél (Eötvös Loránd Tudományegyetem, TTK, diplomamunka címe: Spinsűrűség-hullámok dielektromos tulajdonságai, téma-vezető: Mihály György)

### *Nyelvismeret:*

- angol (szakmaival bővített, C típusú középfokú nyelvvizsga)
- német (C típusú középfokú nyelvvizsga)
- magyar (anyanyelvi)

*Oktatási tevékenység, kutatói utánpótlás nevelés:*

- BSc témavezetés (Szárász Dániel, ELTE fizikus, 2022)
- TDK témavezetés (Szárász Dániel, ELTE, 2021)
- Középiskolás TUDOK (Soczó Bálint, 1. díj, 2022)
- Kutató-diák program (2020-2021, 7 hónapos program)
- Kutató-diák tábor (2022, 2019)
- 2019: GROMACS workshop, ELTE, gyakorlati oktatás a GROMACS szoftver használatához
- 2015: 6. RMC konferencia, gyakorlati oktatás az RMC\_POT szoftver használatához
- 1999-2001: SZFKI-BME oktató laboratóriumában: Haladó szilárdtestfizikai laboratórium

*Pályázatokban való részvétel:*

Társ kutatóként

- TÉT pályázatokban: magyar-szlovén (TÉT\_16-1-2016-0056 és 2018-2.1.11-TET-SI-2018-0001), magyar-japán (TÉT\_16-1-2016-0202)
- OTKA pályázatokban: K142429; K124885; magyar-szlovén SNN 116198; Jelentős nemzetközi hatású kutatócsoport KH130425
- ELKH Kiemelt Kutatási Téma pályázatban: SA-89/2021
- Nemzetközi mérésidő pályázatokban: Spring-8, Japán BL04B2 beamline (2018A1132, 2018B1210), BL08W beamline (2018B1301)

*Tudományometriai mutatók:*

- Publikációk száma nemzetközi referált folyóiratban: 35
- Összesített impakt faktor: 133.158
- Összes független hivatkozás száma: 271 + 24 non-sci
- Effektív idézettség: 224.5 (MTMT, MTA XI. Fizikai Tudományok Osztálya)

*Tudományometriai mutatók az utolsó 5 évben (2018-tól):*

- Publikációk száma nemzetközi referált folyóiratban: 21
- Ebből egyszerzős publikációk száma: 2
- Első szerzős publikációk száma: 11 (+ a 2 egyszerzős)
- Összesített impakt faktor: 97.238
- Utolsó 5 év cikkeire kapott független hivatkozások száma: 146 + 12 non-sci

*Díjak:*

- Nők a tudományban Kiválósági díj 2020
- Wigner Fizikai Kutatóközpont SZFI Publikációs Díj 2019
- American Chemical Society (ACS) Editors' Choice cikk: I. Pethes et al. *J.Phys.Chem. B* **120**, 9204 (2016)

## ***Kompetenciák***

2014 óta foglalkozom folyadékok és amorf anyagok atomi szintű szerkezetének vizsgálatával, szimulációs és kísérleti (neutrodiffrakciós (ND), röntgendiffrakciós (XRD) és röntgenabszorpciós (EXAFS)) módszerek alkalmazásával. Az elmúlt években számos anyagsaládot tanulmányoztam az üvegek és molekuláris folyadékok területén.

Munkám során elsősorban a szimulációk megvalósításán, a kapott konfigurációk elemzésén, és az eredmények kiértékelésén dolgoztam, de tapasztalatot szereztem diffrakciós mérések elvégzésében is (XRD mérések, SPring-8 szinkrotronnál).

Az általam egyik leggyakrabban használt technika a fordított Monte Carlo (Reverse Monte Carlo, RMC) szimuláció, melynek segítségével olyan részecskekonfigurációkat állítunk elő, amelyek egyszerre reprodukálják a diffrakciós és EXAFS mérésekből származó kísérleti adatokat és egyúttal megfelelnek az egyéb ismeretekből származó kényszerfeltételeknek is (pl. sűrűség, kötési preferenciák, szögeloszlások stb.). (RMC++, RMC\_POT kódok)

A másik fontos szimulációs eljárás a klasszikus molekuláris dinamikai (MD) szimulációk köre. Ebben az atomok közötti kölcsönhatásokat effektív párpotenciálok segítségével közelítjük, majd a klasszikus mozgásegyenletek megoldásával határozzuk meg az atomok pozícióját és sebességét leíró trajektóriákat. Az egyensúlyi rendszer részecskekoordinátáiból számított párkorrelációs függvények segítségével kiszámíthatjuk a szerkezeti függvényeket, melyeket a diffrakciós kísérletekből kapott görbékkel vethetünk össze. A kísérleti adatokkal való legjobb egyezést adó kölcsönhatási potenciálok megtalálása alapvető a szerkezet helyes leírásához. (GROMACS, DL\_POLY szoftvercsomagok)

A két módszert ötvözi az RMC\_POT szimuláció, melynek során az RMC eljárásban megszokott módon keressük a kísérleti adatokkal legjobban megegyező részecskekonfigurációkat, de közben az MD szimulációkban is alkalmazott kölcsönhatási potenciálok segítségével energetikailag reális konfigurációkat választhatunk ki, illetve ezek segítenek a molekulák alakjának megtartásában is. (RMC\_POT szoftver)

Nagy tapasztalattal rendelkezem a fenti szimulációs eljárások alkalmazásában. A különböző módszerek együttes használata egyedülálló lehetőséget ad számomra: az anyagok széles spektrumának vizsgálatát teszi lehetővé, olyan esetekben is, ahol egyik vagy másik módszer önmagában nem elegendő.

A szimulációs eljárásokkal kapott, a kísérleti adatokkal kompatibilis részecskekonfigurációk szolgálnak alapul a szerkezeti jellemzők meghatározására. Megismerhetőek többek között a kötési preferenciák, kötéstávolságok, orientációs preferenciák, koordinációs számok, valamint a kötési hálózat topológiai jellemzői.

Az elmúlt években üvegek közül elsősorban a kalkogén üvegek (pl: Ge-As-Se, Ge-Ga-Se, Ge-Ga-S, Ge-Sb-Se, Ge-Sb-S, Ge-Ga-Sb-Se, Ge-Ga-Sb-S, Ge-Te, Ge-Ga-Te, Ge-S) szerkezetéről szereztem ismereteket, de tanulmányoztam fémüvegeket (Pd-Ge, Ca-Mg-Zn) is. A molekuláris folyadékok közül vizsgálataim a vízre, aldehidekre, alkoholokra, alkohol-aldehid és alkohol-víz keverékekre, valamint elektrolit oldatokra terjedtek ki.

Rendelkezem a tudományos munkához szükséges információtechnológiai kompetenciákkal (programozás, szövegszerkesztés, adatfeldolgozás, ábrászerkesztés, prezentációkészítés, bibliográfiai adatkezelés stb.), Windows és Linux operációs rendszereken egyaránt.

A szakmai feladatokon túl a Wigner FK munkavállalóit közösségbe tömörítő szakszervezet vezetésében veszek részt csoport bizalmiként, melynek során közösségépítési, kommunikációs, vezetési és érdekérvényesítési kompetenciákra, valamint (munka)jogi ismeretekre is szert tettem, amelyek nagyon hasznosak lesznek a pályázatokban és más intézményekkel való kapcsolattartásban.

Rendszeresen foglalkozom fiatalokkal (középiskolás kutatódiák program, TDK-zó és BSc-s diákok), mely tevékenységgel elkezdtem felépíteni a témavezetői kompetenciákat is.

Az elmúlt év során munkám a Kutatóközpont által tavaly beszerzett differenciális pásztázó kaloriméter (DSC, Differential Scanning Calorimeter, PerkinElmer DSC-8000) berendezés üzemeltetésével bővült. Ez a berendezés  $-170\text{ }^{\circ}\text{C}$  és  $+750\text{ }^{\circ}\text{C}$  közötti hőmérséklet-tartományban használható (jelenlegi mintatartókkal  $+600\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ig), a speciális mintatartóknak köszönhetően olyan minták is vizsgálhatóak vele, melyek szobahőmérsékleten folyékonyak. Így például már vizsgálni tudtuk alkohol-víz keverékek viselkedését az olvadási hőmérsékletük környezetében.

### ***Válogatott publikációk az utóbbi 5 évből***

1. I. Pethes, L. Pusztai, L. Temleitner, Evolution of the hydrogen-bonded network in methanol-water mixtures upon cooling, *J. Mol. Liq.* **386**, 122494 (2023). (IF: 6.0, független hivatkozások: 0)

Ebben a cikkünkben a metanol-víz keverékekben kialakuló hidrogén-kötés (H-kötés) hálózat viselkedését vizsgáltuk a hőmérséklet és az alkohol koncentráció függvényében, MD szimulációk segítségével. (A választott kölcsönhatási modell alkalmasságát ND és XRD mérési eredményekkel összehasonlítva egy korábbi munkánkban igazoltuk.<sup>1</sup>) Meghatároztuk a különböző molekulák közötti H-kötések számát, a víz és az alkohol donor/akceptor szerepét, a H-kötés szám eloszlását. A H-kötés hálózat topológiáját mind a teljes rendszer, mind az egyes alrendszerek esetében vizsgáltuk, a kialakult klaszterek méret-eloszlását, a primitív gyűrűk típus és méret szerinti eloszlását meghatározva.

2. I. Pethes, P. Jóvári, S. Michalik, T. Wagner, V. Prokop, I. Kaban, D. Száraz, A. Hannon, M. Krbal, Short range order and topology of binary Ge-S glasses, *J. All. Compd.* **936**, 168170 (2023). (IF: 6.2, független hivatkozások: 0)

Ebben a munkában a kalkogén üvegek családjába tartozó germánium-kén üvegek szerkezetével foglalkoztunk. 4 különböző összetételű mintát vizsgáltunk ND, XRD és EXAFS mérésekkel, RMC szimulációk segítségével. Megállapítottuk, hogy mindegyik mintára igaz, hogy benne a germánium szomszédjainak száma 4, a kén szomszédjainak száma pedig 2 (teljesítik az ún. Mott-szabályt). Az üvegek szerkezetét a kémiaileg rendezett hálózat modelljével lehet leírni: a Ge-S kötés minden mintában preferált, kén-kén kötések csak a kénben gazdag összetételű üvegben, míg Ge-Ge kötések csak germániumban gazdag üvegben találhatóak meg. A kapott konfigurációkat topológiailag is elemeztük, megállapítva, hogy a 6

---

<sup>1</sup>I. Pethes et al., *J.Mol.Liq.* **314**, 113664 (2020)

elemű gyűrűk gyakorisága szignifikánsan magasabb, mint véletlenszerű elrendeződés esetében lenne.

3. I. Pethes, Towards the correct microscopic structure of aqueous CsCl solutions with a comparison of classical interatomic potential models, *J. Mol. Liq.* **361**, 119660 (2022). (IF: 6.0, független hivatkozások: 2)

Ebben a munkában tömény cézium-klorid oldatok szerkezetének meghatározásával foglalkoztam. 30 különböző potenciál modellel végeztem MD szimulációkat, 3 különböző töménységű oldaton. Kiszámítottam a modellek által jelzett sűrűséget, diffúziós együtthatót és dielektromos állandót, ezeket az irodalomban fellelhető kísérleti eredményekkel vettem össze. A kapott részecskekonfigurációkból a parciális párkorrelációs függvényeket és diffrakciós szerkezeti függvényeket számítottam ki. Utóbbiakat korábbi mérési eredményekkel vettem össze, megkeresve a kísérleti szerkezeti függvényekkel leginkább kompatibilis potenciál modelleket. Ezen modellek alapján meghatároztam a szerkezet jellemzőit: az ion-víz távolságokat, az ionok körüli vízmolekulák számát, az ion-párok átlagos számát és távolságát, továbbá a kialakult H-kötés hálózat főbb tulajdonságait. Megállapítottam, hogy nem csak a túl sok ionpárt eredményező modellek, de a túl kevés ionpárt eredményező modellek sem összeegyeztethetőek a kísérleti adattal.

4. I. Pethes, L. Pusztai, K. Ohara, L. Temleitner, Temperature-dependent structure of 1-propanol/water mixtures: X-ray diffraction experiments and computer simulations at low and high alcohol contents, *J. Mol. Liq.* **340**, 117188 (2021). (IF: 6.663, független hivatkozások: 4)

Ebben a munkában 1-propanol – víz keverékek szerkezetét vizsgáltuk kísérletek (XRD) és szimulációk (MD) segítségével. A teljes alkohol koncentráción, szobahőmérséklettől fagyáspontig vizsgáltuk a keverékeket. A kapott részecskekonfigurációkból meghatároztuk a parciális radiális eloszlásfüggvényeket. Megvizsgáltuk a kialakuló H-kötés hálózatot, az átlagos H-kötés számot a különböző molekulapárok esetében, az egyes molekulafajták viselkedését hidrogén donor és hidrogén akceptor szerepben. Megállapítottuk, hogy a hálózat a hűtés hatására egyre összefüggőbbé válik.

5. I. Pethes, I. Bakó, L. Pusztai, Chloride ions as integral parts of hydrogen bonded networks in aqueous salt solutions: the appearance of solvent separated anion pairs, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 11038. (2020). (IF: 3.676, független hivatkozások: 14)

Ebben a munkában tömény LiCl oldatokban létrejövő H-kötéses hálózat vizsgálatával foglalkoztunk. A korábbi munkáimban<sup>2</sup> megvizsgált kölcsönhatási potenciálok közül a szerkezet leírására leginkább alkalmasnak bizonyulót kiválasztva, MD szimulációkból kapott konfigurációkban elemeztük a H-kötés hálózat karakterisztikus jellemzőit: a kötések számát, a kialakuló klaszterek méreteit, perkolációt, gyűrűket. Rámutattunk, hogy a szerkezet korrekt leírását nem csak a vízmolekulák hálózata, hanem a klorid ion és a vízmolekulák által közösen alkotott H-kötés hálózat adja meg. Megmutattuk, hogy tömény oldatokban nem csak kontakt és oldószer-szeparált anion-kation párok, de oldószer-szeparált anion-anion párok is találhatóak. A hálózat-analízis segítségével további eszközt sikerült találnunk a kölcsönhatási

---

<sup>2</sup> I. Pethes, *J.Mol.Liq.* **242**, 845 (2017); I. Pethes, *J.Mol.Liq.* **264**, 179 (2018)

potenciálok összehasonlítására: a kísérleti adatokkal jobban egyező modellekben az ionok és vízmolekulák jobb keveredése figyelhető meg a kialakuló H-kötés hálózatban.

6. I. Pethes, V. Nazabal, J. Ari, I. Kaban, J. Darpentigny, E. Welter, O. Gutowski, B. Bureau, Y. Mssaddeq, P. Jóvári, Atomic level structure of Ge-Sb-S glasses: Chemical short range order and long Sb-S bonds, *J. All. Compd.* **774**, 1009 (2019). (IF: 4.65, független hivatkozások: 13)

Ebben a tanulmányban Ge-Sb-S üvegek szerkezetét határoztuk meg ND, XRD és EXAFS mérésekkel és RMC szimulációkkal. Megállapítottuk, hogy az összetevők többnyire követik a  $8 - N$  szabályt (így a germániumnak 4, antimonnak 3, kénnek 2 szomszédja van), de az antimon atomok egy része ennél több kén szomszédal rendelkezik, melyek kissé nagyobb távolságra helyezkednek el. Az üvegek szerkezetét a kémiai rendezett véletlen hálózat modelljével lehet leírni, a germánium és antimon atomok a kén atomok közelségét preferálják, így kénben gazdag üvegekben a Ge és Sb atomok közötti kötések száma elhanyagolható. Kénben szegény ötvözetekben a Ge-Sb párok jelenlétét mutattuk meg.

7. I. Pethes, The structure of aqueous lithium chloride solutions at high concentrations as revealed by a comparison of classical interatomic potential models, *J. Mol. Liq.* **264**, 179 (2018). (IF: 4.561, független hivatkozások: 23)

Ez a közlemény LiCl tömény vizes oldatainak szerkezetével foglalkozik. 29 különböző ion-víz kölcsönhatási modellel végeztem MD szimulációkat, mely modelleket egy korábbi közleményben<sup>3</sup> gyűjtöttem össze. A modellek „jóságát” korábbi kísérleti adatokkal való kompatibilitásuk alapján állapítottam meg, ehhez olyan RMC szimulációkat is végeztem, melyekben a kísérleti adatsorok mellett az MD modellből kapott parciális párkorrelációs függvényekhez (PPCF) való illeszkedést is megköveteltem. Az illeszkedés minősége alapján „rangsorolni” tudtam az egyes modelleket. A LiCl oldatok olyan modelljét adtam meg, mely összhangot teremt a kísérleti és szimulációs eredmények között.

---

<sup>3</sup> I. Pethes, *J. Mol.Liq.* **242**, 845 (2017)

## ***Kutatási terv***

Az amorf anyagok és a folyadékok fizikai, kémiai tulajdonságainak jobb megértése megköveteli ezen anyagok szerkezetének atomi, illetve molekuláris szintű megismerését. A hosszú távú rend hiánya miatt a szerkezetvizsgálathoz speciális technikákra van szükség: a mérések (ND, XRD, EXAFS) mellett fontos szerepe van a szimulációs módszereknek is (RMC, MD, illetve ezek kombinációja). A tervezett kutatásaimat ezen kísérleti és szimulációs eszközök segítségével fogom végezni, kihasználva a szimulációk újszerű, kombinált alkalmazásában rejlő lehetőségeket. Terveimben fontos szerepet kap az idén érkezett új röntgendiffraktométer, amivel az XRD mérések jelentős részét el fogom tudni végezni. A szobahőmérsékleti vizsgálatokat szeretném szélesebb hőmérséklettartományra is kiterjeszteni, ezt teszi lehetővé az új diffraktométerhez tartozó hűtő-fűtő mintakörnyezet, mellyel  $-190\text{ }^{\circ}\text{C}$  és  $+600\text{ }^{\circ}\text{C}$  közötti mintahőmérsékletek érhetőek el. Az egyes anyagoknál a megfelelő hőmérsékleteket a DSC berendezésen végzendő előzetes mérésekkel fogom meghatározni. Az elkövetkező években az alábbi három fő területre szeretnék koncentrálni:

**1. Kalkogén üvegek szerkezete.** A kalkogén (S, Se és Te alapú) üvegeket széles körben használják a fotonika, optika és informatika számos területén (pl. infravörös optikai vezetők, szenzorok, DVD stb.).<sup>4</sup> A szerkezet jellemzői (preferált kötések, legközelebbi szomszédok jellemző száma (azaz a koordinációs szám), kialakuló kötéhálózat stb.) az összetevők arányának függvényében változnak, amit többféle elméleti modellel próbálnak megmagyarázni. A kalkogén üvegeket alkotó atomok többnyire eleget tesznek az ún. Mott-szabálynak, az egyes atomfajták koordinációs száma  $8 - N$ , ahol  $N$  az atom valencia elektronjainak száma. Eszerint például a Ge atomok 4 szomszédal rendelkeznek, az As és Sb atomok koordinációs száma 3, míg a kalkogén atomok 2 kötésben vesznek részt. A kialakuló kötések típusáról a kémiaileg rendezett hálózat modellje ad információt, mely szerint a kalkogén és nem-kalkogén atomok által alkotott kötések preferáltak, sztöchiometrikus összetétel esetén csak ilyenek fordulnak elő. Kalkogén túlsúlyú mintákban megjelennek a kalkogének közötti kötések, míg kalkogénben szegény mintákban a nem-kalkogén atomok által alkotott párok is megfigyelhetőek. Számos fizikai tulajdonság változik az átlagos koordinációs szám (MCN) függvényében. Átlagtér-elméleti számolások alapján  $\text{MCN} \approx 2.4$  esetén átmenet figyelhető meg egy alulhatározott rugalmas és egy túlhatározott merev hálózat között. A két fázis között a modellek egy ún. intermediate (merev, de feszültségmentes topológiai) fázist is valószínűsítene, melyben az üveg öregedés nélkül, reverzibilis módon viselkedik.<sup>5</sup>  $\text{MCN} \approx 2.67$ -nél egy második átmenetet jelez a modell, egy topológiailag 2 dimenziós és egy 3 dimenziós hálózat között. Kalkogén üvegekben az átlagos koordinációs szám jellemzően 2 – 3 között van, így ezek az anyagok kiváló alanyai ezen modellek vizsgálatának.

---

<sup>4</sup> J. L. Adam, X. Zhang (szerk) *Chalcogenide Glasses Preparation, Properties and Applications*, Woodhead Publishing Ltd, Cambridge, 2014; A. R. Hilton *Chalcogenide Glasses for Infrared Optics*, McGraw-Hill, New York, 2010; Musgraves J.D., Hu J., Calvez L. (szerk) *Springer Handbook of Glass*, Springer, Cham, 2019; B. Gholipour et al., *J. Phys. Photonics* **5** (2023) 012501

<sup>5</sup>P. Boolchand et al., *Philos. Mag.* **85**, 3823 (2005)



Az elmúlt évek során számos 2, 3, illetve 4 alkotóelemű kalkogén üveg szerkezetét vizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy a vizsgált anyagokban a  $8 - N$  szabály teljesül, kivéve a Ga tartalmú mintákat, ahol mind a Ga, mind a kalkogén atomok koordinációs száma eltér a Mott-szabály által jelzettől. A kémiai rendezettségre való törekvés eltérő mértékben figyelhető meg a vizsgált üvegekben, leginkább az arzén tartalmú üvegek viselkednek rendezetlenül. Az eltérések alaposabb feltárásához további Ge-As-Se összetételeket szeretnék megvizsgálni, kiegészítve a kétkomponensű (és rendezett) alrendszerek (Ge-Se, As-Se) tanulmányozásával. Mivel ezen ötvözetek nagyon széles összetétel tartományon alkotnak üveget, ez lehetőséget teremt arra is, hogy az átlagos koordinációs szám függvényében kialakuló fázisok jeleit kutathassuk benne. Vizsgálni fogom a kötéhálózat viselkedését, véletlenszerűségét, illetve a benne előforduló jellegzetes motívumokat. Egy másik folytatandó szál az antimon tartalmú üvegek szerkezete, ahol a GeSbS és GeSbSe rendszereket már tanulmányoztam, szeretném ezt a tellúr bázisú üvegekkel teljessé tenni. Az üvegekben megfigyelhető kötési preferenciákat és koordinációs számokat egységes keretek között, a korábbi publikációkban<sup>6</sup> általunk bevezetett „rövid-távú rend koefficiens” (kiterjesztett Warren-Cowley rendparaméter) segítségével is össze szeretném hasonlítani. A vizsgálatokat diffrakciós és EXAFS adatokon alapuló RMC szimulációk segítségével tervezem elvégezni.

**2. Alkohol-víz rendszerekben kialakuló hidrogén-kötés hálózat.** Ezen a vonalon már nagyon sok minden elkészült az elmúlt években, itt elsősorban a kapott eredmények összegzése, egységes módon történő összevetése van hátra. Hogyan befolyásolja a szénlánc mérete a különböző molekulák közötti hidrogénkötések számát, annak hőmérséklet és koncentráció függését? Mennyire tér el a különböző összetevők közötti (víz-víz, alkohol-víz, alkohol-alkohol) H-kötés számok nagysága az összetétel függvényében elméletileg várhatótól (excess H-bond), illetve miként változik ez a hőmérséklettel, illetve az alkohol típusával? A metanol-víz rendszerben a H-kötött vegyes párok esetén a hidrogén donor/akceptor viselkedés alapján megkülönböztetett párok (metanol donor és víz akceptor, illetve metanol akceptor és víz donor) száma nem azonosan változik a hőmérséklettel/koncentrációval, jellemző energiájuk eltérő. Mit lehet mondani a nagyobb szénláncú alkoholok esetében? Vannak-e különbségek az 1-propanol – víz és a 2-propanol – víz rendszerekben kialakuló H-kötés hálózat tulajdonságai között? Ezeket a kérdéseket MD szimulációkból kapott részecskekonfigurációk elemzésével tervezem vizsgálni.

**3. Tömény elektrolit oldatok szerkezete.** Az elektrolit oldatok alapvető fontosságúak mind a biológiában (sejtnedvek), mind az ipar területén (pl. korrózió), de a mindennapi élet állandó velejárói is (pl. tengervíz). Energiatároló rendszerekben való alkalmazásuk miatt napjainkban is kutatások középpontjában állnak.<sup>7</sup> A több évtizedes erőfeszítés ellenére még számos kérdés nyitott a szerkezetükkel kapcsolatban, pl. az ionok körüli vízmolekulák száma és orientációja, a kontakt ionpárok jelenléte stb.<sup>8</sup> Ezen a területen eddig 2 rendszert vizsgáltam alaposan (LiCl és CsCl vizes oldatai). Ennek során megállapítottam, hogy az erősen információhiányos

<sup>6</sup>I. Pethes et al., *J. Phys. Chem. B* **120** (2016) 9204

<sup>7</sup>B.Y.Tang et al., *Energy. Environ. Sci.* **12**, 3288 (2019); D. L. Chao et al., *Sci. Adv.* **6**, eaba4098 (2020); J. H. Huang et al. *Small Methods* **3**, 1800272 (2019)

<sup>8</sup>N. F. A. van der Vegt et al., *Chem. Rev.* **116**, 7626 (2016); Y. Marcus, *Chem. Rev.* **109**, 1346 (2009)

helyzetben (jellemzően 2 diffrakciós mérés 10 független parciális párkorrelációs függvényhez) több kölcsönhatási potenciál modellel végzett MD szimuláció segítségével a szerkezet megbízhatóbb leírásához juthatunk. Az elkövetkező években folytatni szeretném a megkezdett munkát, további cézium halogenid és más sók vizsgálatával. Számos ion-víz potenciál modellel végzek MD szimulációkat, a kapott konfigurációkból számolt szerkezeti függvényeket diffrakciós kísérleti adatokkal összevetve, valamint a H-kötéses hálózat analízisével keresem meg a legalkalmasabb potenciálszetteket. Az MD szimulációkat szükség szerint RMC\_POT szimulációkkal fogom kiegészíteni a kísérleti eredményekkel való minél jobb egyezés érdekében. A kapott részecske-konfigurációkból szerkezeti jellemzőket (koordinációs számok, kötés távolságok, szögeloszlások stb.), a H-kötés hálózat jellemzőit (H-kötés számok, klaszterek, gyűrűk, esetleges mikro-szegregáció) fogom meghatározni. Az 1:1 típusú sók vizsgálatát 1:2 ( $MgCl_2$ ,  $CaCl_2$ ) sókkal folytatnám. Hosszabb távon alkohol-víz oldószeres sóoldatok vizsgálatával kapcsolnám össze a vizsgált rendszereket. Több oldat esetében már korábban publikált adatok állnak rendelkezésre. Ezeket az intézetben újonnan beszerzett röntgendiffraktométeren végzendő új mérésekkel szeretném kiegészíteni. A szobahőmérsékletű vizsgálatokat szeretném kiterjeszteni szélesebb hőmérséklet-tartományra is, kihasználva az új diffraktométerhez tartozó, minták hűtését-fűtését lehetővé tévő kályhát is. Az oldatok vizsgálatra érdemes hőmérsékleti tartományainak kiválasztását a DSC berendezésen végzendő előzetes mérések segítségével tervezem elvégezni.

### ***Függelék: rövidítések jegyzéke***

ND: neutron-diffrakció

XRD: röntgen-diffrakció

EXAFS: Extended X-ray Absorption Fine Structure, a röntgenabszorpciós hatáskeresztmetszet finomszerkezete

RMC: fordított Monte Carlo

MD: molekuláris dinamika

MCN: átlagos koordinációs szám

H-kötés: hidrogén-kötés

DSC: Differential Scanning Calorimeter, differenciális pásztázó kaloriméter