

ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΥΛΙΚΩΝ ΣΕ ΗΥ  
Ερωτήσεις ανακεφαλαίωσης

---

1. Ποιες είναι οι βασικές παραδοχές της κλασσικής ατομιστικής προσομοίωσης;
2. Ποια είναι η γενική σχέση για τη δυναμική ενέργεια ενός συστήματος  $N$  ατόμων; Ποια είναι η σημασία του κάθε όρου;
3. Περιγράψτε το δυναμικό σκληρής σφαίρας.
4. Περιγράψτε το δυναμικό μαλακής σφαίρας. Τι ρόλο παίζει ο εκθέτης στον παρανομαστή;
5. Περιγράψτε το δυναμικό αλληλεπίδρασης Lennard–Jones. Ποιος όρος είναι υπεύθυνος για το ελκτικό και ποιος για το απωστικό μέρος; Ποια είναι η σημασία των σταθερών στη σχέση;
6. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης Lennard–Jones μπορεί να γραφεί ισοδύναμα και ως:

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

Πως σχετίζονται οι σταθερές  $A$  και  $B$  με τις σταθερές  $\varepsilon$  και  $\sigma$  του ερωτήματος 5; Τι μονάδες έχουν;

7. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης Lennard–Jones κάποιες φορές γράφεται ισοδύναμα και ως:

$$V(r) = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

Πως σχετίζονται οι σταθερές  $\varepsilon$  και  $r_0$  με τις  $A$  και  $B$  του ερωτήματος 6; Τι μονάδες έχουν;

8. Βρείτε την απόσταση όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης Lennard–Jones έχει την ελάχιστη τιμή του. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης στο ελάχιστο; Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο;
9. Τι είναι οι συνδυαστικοί κανόνες και πότε τους χρησιμοποιούμε; Δώστε τις σχέσεις για τους συνδυαστικούς κανόνες Lorentz–Berthelot.
10. Περιγράψτε το δυναμικό αλληλεπίδρασης Morse. Ποια είναι η σημασία των σταθερών στη σχέση; Ποιες είναι οι μονάδες τους;
11. Βρείτε την απόσταση όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης Morse έχει την ελάχιστη τιμή του. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης στο ελάχιστο; Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο;
12. Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας μεταξύ δύο συγκεκριμένων ιόντων δίνεται από τη σχέση

$$V(r) = \frac{B}{r^9} - \frac{Ae^2}{r}$$

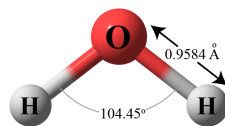
όπου  $e$  το φορτίο του ηλεκτρονίου και  $A$  και  $B$  σταθερές. Βρείτε την απόσταση ισορροπίας των δυο ιόντων. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια όταν τα ιόντα βρίσκονται στην απόσταση ισορροπίας; Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο στην απόσταση ισορροπίας;

13. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ ιόντων  $Mg^{+2}$  και  $O^{-2}$  στο οξειδίου του μαγνησίου  $Mg^{+2}O^{-2}$  δίνεται από τη σχέση:

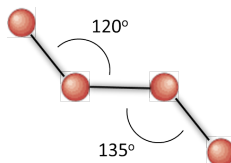
$$V(r) = \frac{B}{r^9} - \frac{A(Ze)^2}{r}$$

όπου  $A$ ,  $B$  είναι σταθερές,  $e$  είναι το φορτίο του ηλεκτρονίου και  $Z = 2$ . Το ίδιο δυναμικό αλληλεπίδρασης χρησιμοποιείται μεταξύ ιόντων  $Na^+$  και  $Cl^-$  στο χλωριούχο νάτριο  $Na^+Cl^-$ , όμως με  $Z = 1$ . Βρείτε το λόγο των αποστάσεων ισορροπίας μεταξύ  $Mg^{+2}O^{-2}$  και  $Na^+Cl^-$ .

14. Τι είναι η απόσταση αποκοπής του δυναμικού αλληλεπίδρασης; Ποιες είναι τυπικές τιμές για μέταλλα και οργανικά; Γιατί την χρησιμοποιούμε;
15. Ποιοι είναι οι τρεις βασικές μεθοδολογίες μελέτης ενός συστήματος;
16. Πότε ισχύει η κλασική προσέγγιση;
17. Τι εννοούμε με τον όρο *στατική μελέτη*;
18. Περιγράψτε τη μέθοδο Newton για την εύρεση ελαχίστου συνάρτησης μιας μεταβλητής.
19. Περιγράψτε τη βασική ιδέα μιας προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής.
20. Ποια είναι η εξίσωση κίνησης Newton και ποιες οι εξισώσεις κίνησης Hamilton;
21. Για τον αρμονικό ταλαντωτή γράψτε την εξίσωση κίνησης Newton και τις εξισώσεις κίνησης Hamilton.
22. Περιγράψτε τον βασικό αλγόριθμο Μοριακής Δυναμικής.
23. Τι ονομάζουμε χώρο των φάσεων;
24. Περιγράψτε το χώρο φάσεων του αρμονικού ταλαντωτή.
25. Ποιο είναι το πιο χρονοβόρο υπολογιστικά τμήμα μιας προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής.
26. Τι είναι οι περιοδικές οριακές συνθήκες; Τι είναι η συνθήκη ελαχίστων εικόνων;
27. Πως κάνουμε προσομοίωση σε μη περιοδικά συστήματα, πχ επιφάνειες;
28. Πως επιλέγουμε τις αρχικές θέσεις και τις αρχικές ταχύτητες σε μια προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής;
29. Πως επιλύονται αριθμητικά οι εξισώσεις κίνησης; Περιγράψτε τον αλγόριθμο Verlet.
30. Πως διαλέγουμε το χρονικό βήμα για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης; Ποιες είναι τυπικές τιμές;
31. Ποια είναι τα κύρια στατιστικά σύνολα; Ποιες είναι οι μακροσκοπικές ποσότητες που παραμένουν σταθερές σε κάθε στατιστικό σύνολο;
32. Πως υπολογίζεται η θερμοκρασία ενός συστήματος;
33. Τι είναι η διεδρη γωνία; Περιγράψτε τη διαμόρφωση του βουτανίου όταν η διεδρη γωνία που σχηματίζουν τα τέσσερα άτομα άνθρακα έχει τιμή  $180^\circ$  ή  $0^\circ$ .
34. Τι είναι οι εσωτερικές συντεταγμένες; Πόσες εσωτερικές συντεταγμένες χρειαζόμαστε για να περιγράψουμε ένα μόριο με  $N$  άτομα; Γιατί είναι λιγότερες από τις καρτεσιανές συντεταγμένες που θα χρειαζόμασταν;
35. Γράψτε τις εσωτερικές συντεταγμένες για το μόριο του νερού που απεικονίζεται παρακάτω:



36. Γράψτε τις εσωτερικές συντεταγμένες για το υποθετικό μόριο τεσσάρων ατόμων που απεικονίζεται παρακάτω. Τα μήκη όλων των δεσμών είναι  $1.5\text{Å}$  ενώ η διεδρη γωνία είναι  $175^\circ$ .



37. Ποια είναι η γενική μορφή ενός πεδίου δυνάμεων για οργανικά μόρια; Ποια είναι η σημασία κάθε όρου;
38. Περιγράψτε τη διαμόρφωση με τη μικρότερη τιμή ενέργειας του βουτανίου στην αέρια φάση.
39. Τι είναι οι μη κανονικές διεδρες γωνίες και γιατί τις χρησιμοποιούμε σε ένα πεδίο δυνάμεων;
40. Τι είναι τα *μερικά ατομικά φορτία* και γιατί τα χρησιμοποιούμε σε ένα πεδίο δυνάμεων;
41. Πως κατασκευάζουμε τη μοναδιαία κυψελίδα του κρυσταλλικού χαλκού με δομή fcc;
42. Πως μεταβάλλεται η δυναμική ενέργεια ενός συστήματος χαλκού σαν συνάρτηση της πλεγματικής σταθεράς;
43. Περιγράψτε τη μεθοδολογία με την οποία προσδιορίζουμε *στατικά* την πλεγματική σταθερά ενός μετάλλου με δομή fcc;
44. Τι είναι το μέτρο ελαστικότητας όγκου; Πως ορίζεται; Ποιες είναι οι συνήθεις μονάδες μέτρησης; Με ποια μεθοδολογία το προσδιορίζουμε;
45. Πως προσδιορίζουμε την σωστή πλεγματική σταθερά για μια δεδομένη θερμοκρασία; Ποιο στατιστικό σύνολο χρησιμοποιούμε στην προσομοίωση;
46. Ποιο είναι το χρονικό βήμα που χρησιμοποιούμε στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής του χαλκού; Γιατί δεν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε βήμα 10 φορές μεγαλύτερο; Γιατί δεν χρησιμοποιούμε βήμα 10 φορές μικρότερο;
47. Τι είναι ο συντελεστής θερμικής διαστολής; Πως ορίζεται; Σε τι μονάδες δίνεται; Με ποια μεθοδολογία τον υπολογίζουμε χρησιμοποιώντας προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής;
48. Ποια είναι η διαμόρφωση του μορίου της αιθανόλης στην αέρια φάση;
49. Τι είναι η ενθαλπία εξάτμισης; Πως ορίζεται; Με ποια διαδικασία την υπολογίζουμε;
50. Τι είναι η συνάρτηση ακτινικής κατανομής; Πως ορίζεται; Ποια είναι η τυπική μορφή της για στερεά και υγρά; Τι δείχνουν οι κορυφές της;
51. Τι μορφή έχει η υπολογισμένη συνάρτηση ακτινικής κατανομής  $g_{OH}$  για το μόριο της αιθανόλης στην υγρή φάση; Τι δείχνει η κάθε κορυφή;