

ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΥΛΙΚΩΝ ΣΕ ΗΥ
Ερωτήσεις ανακεφαλαίωσης

1. Ποιες είναι οι βασικές παραδοχές της κλασικής 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 ε και σ 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 ε 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

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

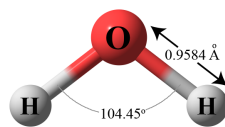
όπου e το φορτίο του ηλεκτρονίου και A και B σταθερές. Βρείτε την απόσταση ισορροπίας των δυο ιόντων. Ποια είναι η δυναμική ενέργεια όταν τα ιόντα βρίσκονται στην απόσταση ισορροπίας; Ποια είναι η δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο στην απόσταση ισορροπίας;

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

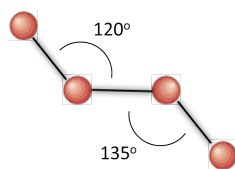
$$V(r) = \frac{B}{r^9} - \frac{A(Ze)^2}{r}$$

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. Ποιες είναι οι τρεις βασικές μεθοδολογίες μελέτης ενός συστήματος;
16. Πότε ισχύει η κλασσική 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 σε μια προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής; Περιγράψτε τον αλγόριθμο Verlet.
30. Πως διαλέγουμε το χρονικό βήμα για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης σε μια προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής; 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° ή 0° .
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\AA ενώ η διεδρη γωνία είναι 175° .



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;