

1. Boltzmannova pravděpodobnost

Atom vodíku má první vzbuzeou hladinu ($n = 2$) ležící 10.2 eV nad základní hladinou ($n = 1$). Jaká populace atomů vodíku je v této vzbuzeou hladině ve sluneční fotosféře ($T = 5800$ K)? Vyšší stavy zanedbejte (ve skutečnosti jde o divergentní řadu, přesto si to můžeme dovolit – proč?).

Rada: multiplicita všech stavů s $n = 1$ je 2 (2 projekce spinu), multiplicita všech stavů s $n = 2$ je 8 = $[1(s)+3(p)] \times 2$.

qdd 5.5

2. Znovu Boltzmannova pravděpodobnost

Vibrace vody (H_2^{16}O) jsou (v cm^{-1}): 3657.1, 1594.7, 3755.9. Vypočtete populaci molekul vody v základním stavu za normální teploty varu. Můžete provést vhodná zjednodušení. Je aproximace molekuly vody rigidní geometrií vhodná?

8.66

3. Entropie

Vypočtete minimální energii, která je potřeba podle Druhého zákona termodynamiky při teplotě 300 K k uložení 1 TB dat.

1.57

4. Tepelná vlnová délka

Kolik je de Broglieova tepelná vlnová délka

- celé molekuly vody za teploty 0°C ,
- atomu vodíku za téže teploty?
- Odhadněte střední vzdálenost molekul vody v kapalně vodě z hustoty.

Jaké důsledky z toho plynou pro klasické simulace vody? Délka vazby O–H je asi 1 Å.

1.15 (a) 1.11 (b) 2.70 (c)

5. Vodíková vazba

- Odhadněte energii vodíkové vazby z výparné entalpie vody (25°C : $\Delta_{\text{vap}}H_m = 46 \text{ kJ mol}^{-1}$).
- Odhadněte energii vodíkové vazby z viskozity vody při dvou teplotách pomocí Arrheniova zákona. Data: $\eta(0^\circ\text{C}) = 1.788 \text{ mPa s}$, $\eta(25^\circ\text{C}) = 0.890 \text{ mPa s}$.
- Odhadněte parciální náboje z dipólového momentu molekuly vody ($\mu = 1.85 \text{ D}$, kde $1 \text{ D} = 1 \text{ Debye} = 3.335641 \times 10^{-30} \text{ C m}$) a geometrie molekuly (vazebný úhel HOH je 104.5° , délka vazby O–H je 0.96 Å). Náboje udejte v e.
- Populární model vody SPC/E má náboj na vodíku 0.4238 e. Čím je způsoben rozdíl oproti vypočtené hodnotě?

(a) 22 kJ/mol „ $= 3.6 \times 10^{-20} \text{ J}$ “ (b) 19 kJ/mol „ $= 3.1 \times 10^{-20} \text{ J}$ “ (c) 0.328 e (d) Efektivní zahrnutí dipólového indukovaného dipólu v kapalně vodě.

6. Mikroskop atomárních sil

AFM je schopen měřit sílu mezi vzorkem a hrotem atomárních rozměrů. Odhadněte maximální přitažlivou sílu pro hrot z křemíku a křemíkovou podložku. Podložku aproximujte rovnoměrným rozložením atomů, hrot jedním atomem. Hustota křemíku je 2.329 g cm^{-3} . Parametry Lennard-Jonesova potenciálu křemíku jsou: $\epsilon = 0.31 \text{ kcal mol}^{-1}$, $\sigma = 4.1 \text{ Å}$, molární hmotnost 28 g mol^{-1} .

Rada: Použijte vzorec z přednášky č. 02 slide 11.

Nd 89

7. Nejistoty

Simulace tekutiny v *NPT* souboru dala průměrnou hustotu $\rho = m/\langle V \rangle = 0.7813(32) \text{ g cm}^{-3}$, kde $v()$ je odhad standardní chyby v jednotkách posledního platného místa. Simulace trvala 4 hodiny. S přesností nejsme spokojeni, chceme dosáhnout nejistoty $\pm 0.001 \text{ g cm}^{-3}$ na hladině 95 %. Jak dlouho musíme za jinak stejných podmínek simulovat?

$$t_{\text{new}} = 164 \text{ h}$$

8. Nejistoty

Vypočetli jste následující entalpie ($H = \langle U_{\text{pot}} + pV \rangle$) dvěma nezávislými simulacemi v boxu s $N = 1000$ modelovými molekulami vody v *NPT* souboru:

T (K)	H (1×10^{-18} J)
310	-65.186(23)
290	-67.671(21)

Hodnoty v závorkách jsou odhadnuté standardní chyby v jednotkách posledního místa. Vypočtěte molární a specifickou tepelnou kapacitu modelu vč. odhadu chyb.

$$C_p = 74.8(10) \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad c_p = 4.16(6) \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

9. Nejistoty

Provedli jsme 10 nezávislých simulací nanočástice ve vodě, každé po dobu 10 ns. Naměřili jsme následující velikosti posunutí r polohy těžiště částice během 10 ns:

měření	r/nm
1	0.89
2	1.16
3	1.15
4	0.92
5	1.09
6	2.23
7	2.23
8	2.35
9	2.12
10	1.42

Vypočtěte koeficient difuze částice včetně odhadu standardní chyby, výsledek uveďte v $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$.

Rada: $\langle r^2 \rangle = 6Dt$

$$D = 2.01 \times 10^{-11} \text{ cm}^2 \text{s}^{-1} \pm 0.1$$

10. Plánujeme simulaci

Představte si, že chceme simulovat solanku (roztok NaCl ve vodě) o molalitě 3 mol kg^{-1} za teploty 20°C . Chceme mít 40 párů iontů v simulačním boxu.

- Vypočtěte potřebný počet molekul vody.
- Vypočtěte velikost hrany kubické simulační buňky v Å. Hustota solanky o molalitě 3 mol kg^{-1} je 1.108 g cm^{-3} .

$$a) 9.87 \times 10^4, b) 28.6 \text{ Å}$$