

jméno	zápočet	úkoly	test	průměr	známka

Čas 90 minut. Povoleny jsou kalkulačky. Nejsou povoleny žádné písemné pomůcky.

U otázek s výběrem a, b, c... odpovědi (b) kroužkujte. Platí:

1. Vždy je alespoň jedna odpověď správná.
2. **Správných odpovědí může být více.** Pro dosažení plného počtu bodů nutno **označit všechny**, není-li uvedeno jinak.
3. Nesprávná odpověď v téže otázce zpravidla ruší správnou.
4. Za zvlášť nesprávnou odpověď je -1 bod.

U otázek označených **?** uvádějte vždy úvahu či výpočet, které vás dovedly k odpovědi. Jinak nebude Vaše odpověď uznána!

Nezapomínejte na jednotky u veličin.

Můžete potřebovat:

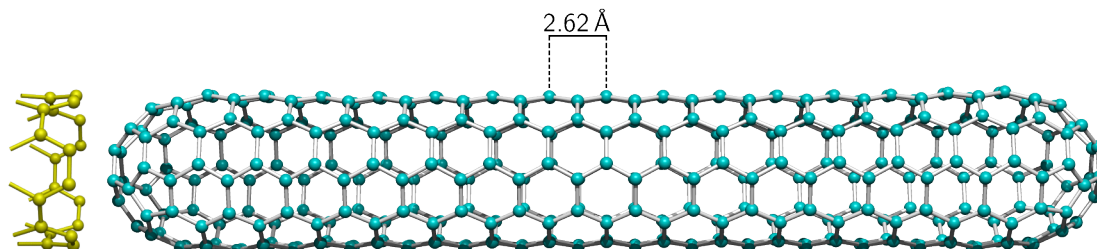
Avogadrova konstanta: $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Boltzmannova konstanta: $k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

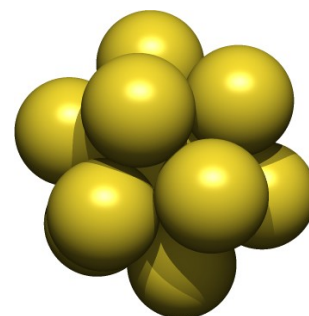
Molární plynová konstanta: $R = 8.3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Planckova konstanta: $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$

1. (10 bodů) Kolik by vážila nanotrubička omotaná kolem rovníku (40 Mm)?



2. (10 bodů) Zlato krystaluje v fcc mřížce. Provádíme krystalizaci se zárodkem (seeded crystallization) o velikosti 13 atomů (viz vpravo). Simulujeme proto v periodických okrajových podmínkách celkem 1000 atomů zlata s tím, že 13 atomů zárodka má zafixované polohy (v průběhu simulace se nepohybují). Průměrná kinetická energie systému byla $2.222 \times 10^{-17} \text{ J}$. Vypočtěte teplotu.



3. (10 bodů) Při simulaci v NPT souboru jsme získali následující hodnoty střední potenciální energie a objemu systému $N = 500$ molekul vody (rigidní model) při teplotě $T = 300 \text{ K}$ a tlaku 1 bar. Vypočtěte molární výparnou entalpii modelu vč. odhadu chyby. Použijte vhodné aproximace.

$\langle E_{\text{pot}} \rangle / (10^{-18} \text{ J})$	$\langle V \rangle / \text{nm}^3$
$-32.87(3)$	$14.97(12)$

Čísla v závorkách jsou odhady standardní chyby v jednotkách posledního místa.

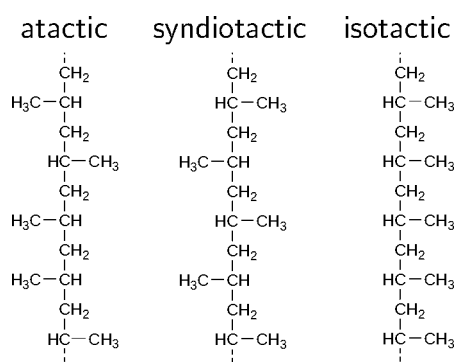
4. (5 bodů) Spočítali jsme, že chemický potenciál molekuly v jistém systému je 1.234(7) kJ/mol. V literatuře jsme našli hodnotu 1.255(12) kJ/mol. V závorkách jsou směrodatné odchylky v jednotkách posledního místa. Jsou obě hodnoty v souladu na hladině spolehlivosti 95 %?

5. (5 bodů) Mikrokanonický soubor je charakterizovaný:

- konstantním počtem částic; energii je možno měnit vykonáním práce, ale ne přenosem tepla
- konstantním chemickým potenciálem
- konstantním počtem částic, energie se může měnit
- konstantním počtem částic, objemem i energií

6. (5 bodů) Polypropylen (PP) lze syntetizovat v několika izomerech lišících se konformací okolo chirálních uhlíků. V izotaktickém PP mají všechny chirální uhlíky stejnou konformaci. V ataktickém PP jsou konformace náhodné. Uvažujte roztok 100-merů v dobrém rozpouštědle. Odhadněte rozdíl chemických potenciálů mezi oběma formami při $T = 300$ K. Předpokládejte, že střední energie všech forem je stejná.

Bonus (+5): Která forma je lépe rozpustná v běžných organických rozpouštědlech?



7. (5 bodů) Uvažujte jednoatomový ideální plyn v grandkanonickém souboru daném chemickým potenciálem μ , objemem V a teplotou T . Napište výraz pro střední hodnotu počtu částic, $\langle N \rangle$, a vypočítejte jej. (Tip: můžete být užitečné spočítat derivaci grandkanonické partiční funkce podle μ nebo jiné vhodné veličiny).

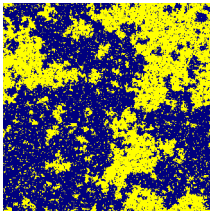
8. (5 bodů) Kterou funkcí (kterými funkcemi) lze dobře popsat odpudivou neelektrostatickou část interakce atom–atom (A, B, C, r_0 jsou vhodné kladné konstanty)?

- Ae^{-Br}
- $K(r - r_0)^2$
- C/r
- A/r^{12}

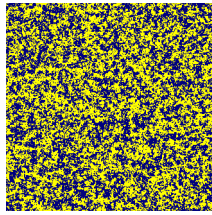
9. (5 bodů) Které síly jsou vazebné?

- Interakce typu Lennard-Jones obou kyslíků v molekule $\text{CH}_2\text{OH}-\text{CH}_2\text{OH}$
- Torzní potenciál pro diedrický úhel C-C-C-C v butanu
- Interakce parciálních nábojů na kyslíku v molekule $\text{CH}_2\text{OH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{OH}$
- Deformace úhlu H-O-H v molekule vody

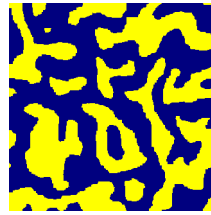
10. (5 bodů) Studujete model mřížkového plyn ve dvou dimenzích. Která konfigurace je typická pro kritický bod kondenzovaná fáze/plyn?



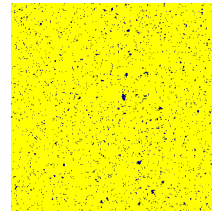
a



b



c



d

11. (5 bodů) Verletova integrační metoda je dána vzorcem (h = integrační krok, r = poloha částice, $f(r)$ je síla vypočtená z polohy r , m je hmotnost):

- a $r(t+h) := r(t) + hf(r(t+h/2))/m$
- b $r(t+h) := r(t) + hf(r(t-h/2))/m$
- c $r(t+h) := r(t-h) + h^2 f(r(t))/m$
- d $r(t+h) := 2r(t) - r(t-h) + h^2 f(r(t))/m$

12. (5 bodů) Který termostat je nejméně vhodný pro rychlou změnu teploty systému?

- a CSVR (Bussi et al.)
- b Andersenův
- c Berendsenův (frikční)
- d Maxwellův–Boltzmannův
- e Noseův–Hooverův

13. (5 bodů) Simulujeme metodou Monte Carlo dvojatomovou molekulu, která má i vnitřní stupně volnosti (vibrace). Pohyby označíme takto: P = náhodný posun těžiště molekuly, R = náhodná rotace molekuly kolem těžiště, V = změna vzdálenosti obou atomů. Které schéma střídání těchto tří pohybů je **špatně**? ([:...:] značí opakování, např. [:AB:] = ABABABABAB...)

- a [:PRV:]
- b [:RPVP:]
- c Náhodné s pravděpodobnostmi pohybů P=0.5, R=0.25, V=0.25
- d Náhodné s pravděpodobnostmi pohybů P=1/3, R=1/3, V=1/3

14. (5 bodů) Simulujeme hustou nadkritickou páru v NVT souboru pro několik hodnot N a V s tím, že poměr $\rho = N/V$ je konstantní. Jaký vzorec použijeme pro korekci tlaku na počet částic? A a B jsou konstanty, které fitujeme spolu s termodynamickou limitou, P_∞ .

- a $P \approx P_\infty + A/N$
- b $P \approx P_\infty + A/N + B \ln N/N$
- c $P \approx P_\infty + AN$
- d $P \approx P_\infty + A/N^{1/3}$
- e $P \approx P_\infty + A/N^3$

15. (5 bodů) Simulujeme kapalnou vodu. Jednou za čas vložíme na náhodné místo v periodické simulační buňce molekulu kyslíku. Vždy vypočteme změnu potenciální energie ΔE po vložení této molekuly; v simulaci pokračujeme s původní konfigurací bez kyslíku. V průběhu simulace

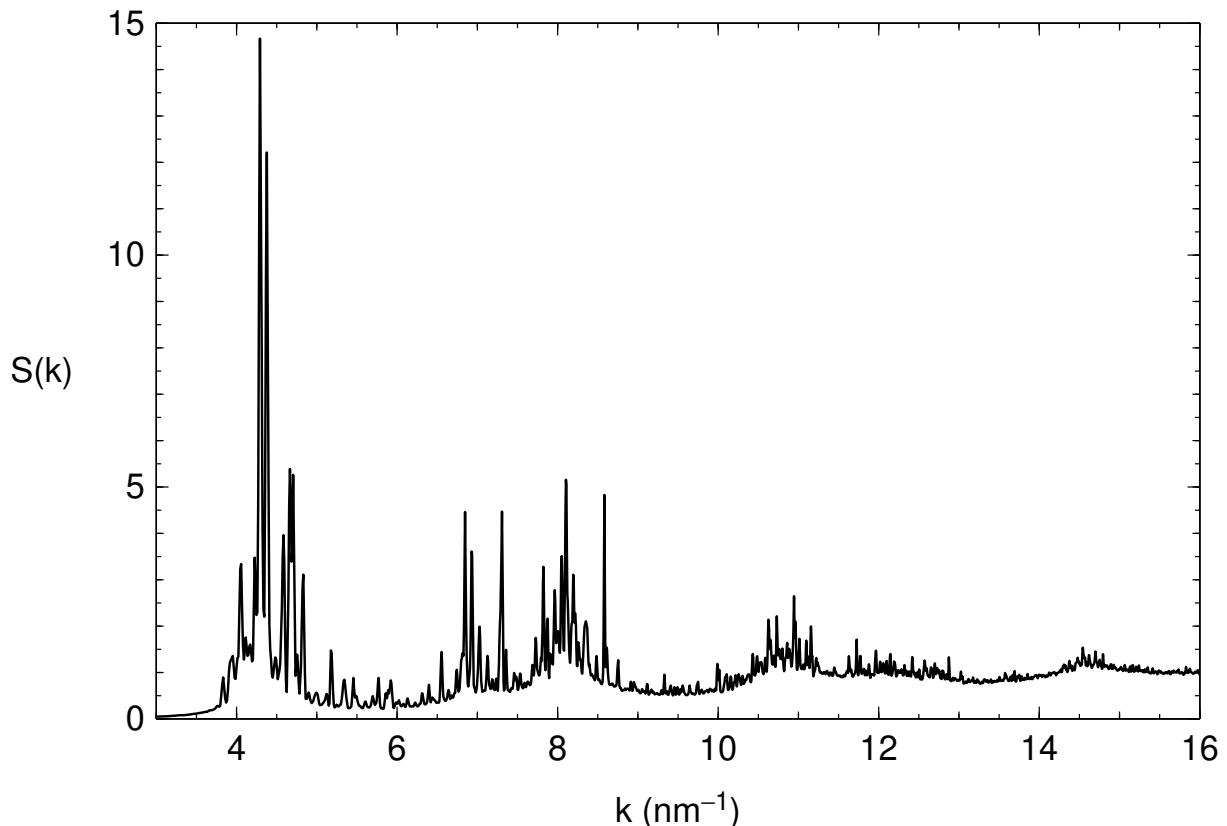
vypočteme veličinu

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right)$$

kde index i značí i -té měření z m . Jakou veličinu můžeme takto stanovit?

- a Henryho konstantu pro rozpouštění kyslíku ve vodě
- b teplotu roztoku kyslíku ve vodě
- c radiální distribuční funkci voda–kyslík v nekonečné vzdálenosti
- d parciální tlak kyslíku nad roztokem kyslíku ve vodě
- e tlak roztoku kyslíku ve vodě

16. (5 bodů)



Při mírném ochlazení (na 830 K) boxu obsahujícího 2048 atomů zlata za vyššího tlaku byl získán strukturní faktor dle obrázku. (Je to sferikalizovaný strukturní faktor a křivka je mírně vyhlazená pro odstranění šumu. Použita je krystalografická definice vlnočtu, $k = 2\pi/\lambda$.) Co to znamená?

- a Systém zkrystalizoval a je složen z monokrystalu v souladu s periodickými okrajovými podmínkami.
- b Systém zkrystalizoval a je složen z několika krystalků (polykrystalický materiál).
- c Systém je ve skelném stavu.
- d Systém nezkrystalizoval, je to kapalina.
- e V systému vznikly bubliny.

Bonus (+5): jaká je typická vzdálenost dvou sousedících atomů zlata v systému?

17. (5 bodů) Pro sílu mezi atomy (zrny) i a j v disipativní částicové dynamice platí:

$$\vec{f}_{ij} = \vec{f}_{ij}^C + \vec{f}_{ij}^D + \vec{f}_{ij}^R$$

kde C označuje konzervativní síly (silové pole), D disipativní (frikční) člen a R náhodnou sílu. Co platí?

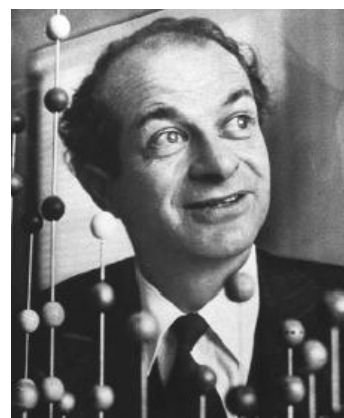
- a síla \vec{f}_{ij}^C je rovnoběžná s \vec{r}_{ij} , \vec{f}_{ij}^D a \vec{f}_{ij}^R jsou navzájem rovnoběžné, ale obecně ne rovnoběžné s \vec{r}_{ij}
 - b síly \vec{f}_{ij}^C , \vec{f}_{ij}^D a \vec{f}_{ij}^R jsou rovnoběžné s \vec{r}_{ij}
 - c síla \vec{f}_{ij}^C je rovnoběžná s \vec{r}_{ij} , \vec{f}_{ij}^D a \vec{f}_{ij}^R mají obě náhodný a nezávislý směr
 - d síly \vec{f}_{ij}^C a \vec{f}_{ij}^D jsou rovnoběžné s \vec{r}_{ij} , síla \vec{f}_{ij}^R má náhodný směr
- kde $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$

(Celkem 100 bodů. Můžete zkusit i bonusové otázky.)

Bonusové otázky

bonus 18. (+5 bodů) Napište jméno amerického chemika (1901–1994), který dostal dvě Nobelovy ceny – za chemii a za mír. Cena za chemii byla udělena “for his research into the nature of the chemical bond and its application to the elucidation of the structure of complex substances”. Dále:

1. Pracoval v oblasti kvantové chemie a je autorem nejpoužívanější škály definující elektronegativitu atomu.
2. Vysvětlil rozpor mezi „kalorimetrickou“ a „spektroskopickou“ hodnotou entropie vodní páry pomocí reziduální entropie ledu.
3. Spolu s Robertem Coreym a Hermanem Bransonem navrhl základní struktury proteinů, alfa helix a beta skládaný list.
4. Objevil abnormalitu chování hemoglobinu S, který způsobuje srpkovou anémii.
5. Propagoval požívání velkého množství vitamínu C jako prevenci různých chorob.



(Bonusy 15 bodů.)