

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ Ι

ΑΣΚΗΣΕΙΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ

ΔΕΥΤΕΡΑ 4 ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΥ 2023, 16:00 – 20:00, ΑΜΦΙΘΕΑΤΡΟ ΧΗΜΙΚΟΥ

ΑΣΚΗΣΗ 1: ΠΡΟΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΕΝΘΑΛΠΙΑΣ ΕΞΑΤΜΙΣΕΩΣ ΚΑΘΑΡΟΥ ΥΓΡΟΥ ΝΕΡΟΥ ΣΕ ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΚΑΙ ΠΙΕΣΗΣ ΔΩΜΑΤΙΟΥ (298.15 K, 1 Atm) ΜΕΣΩ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

Περίληψη Άσκησης:

Στο πλαίσιο της άσκησης θα γίνει συνοπτική παρουσίαση των βασικών μεθόδων προσομοίωσης σε διάφορες κλίμακες μεγέθους και χρόνου των υπό μελέτη συστημάτων (multi-scale simulation techniques) και θα δοθεί έμφαση στις μεθόδους κλασικής μοριακής δυναμικής προσομοίωσης.

Στη συνέχεια θα γίνει επίδειξη μοριακής δυναμικής προσομοίωσης του καθαρού υγρού νερού σε συνθήκες σταθερής πίεσης και θερμοκρασίας δωματίου (ambient conditions: 298.15 K, 1 Atm), όπου θα παρουσιαστούν βήμα προς βήμα όλα τα στάδια διεξαγωγής της προσομοίωσης με χρήση ελεύθερου λογισμικού, καθώς και το στάδιο της εξαγωγής των φυσικοχημικών ιδιοτήτων του νερού (με έμφαση στον υπολογισμό της ενθαλπίας εξάτμισης) που προκύπτουν από την ανάλυση των μοριακών τροχιών του συστήματος.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων θα συγκριθούν με διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα και θα γίνει έμφαση στη συνέργεια μεταξύ προσομοίωσης και πειράματος για την βαθύτερη κατανόηση των διαφόρων φυσικοχημικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα σε μοριακό/διαμοριακό επίπεδο.

ΔΕΥΤΕΡΑ 18 ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΥ 2023, 16:00 – 20:00, ΑΜΦΙΘΕΑΤΡΟ ΧΗΜΙΚΟΥ

ΑΣΚΗΣΗ 2: ΠΡΟΔΙΟΡΙΣΜΟΣ ΓΡΑΜΜΟΜΟΡΙΑΚΟΥ ΟΓΚΟΥ ΥΓΡΩΝ ΜΙΓΜΑΤΩΝ ΝΕΡΟΥ – ΠΡΟΠΑΝΟΛΗΣ-1 ΣΕ ΣΥΝΘΗΚΕΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΚΑΙ ΠΙΕΣΗΣ ΔΩΜΑΤΙΟΥ (298.15 K, 1 Atm) ΜΕΣΩ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ

Περίληψη Άσκησης:

Στο πλαίσιο της άσκησης θα γίνει επίδειξη μοριακής δυναμικής προσομοίωσης υγρών μιγμάτων νερού – προπανόλης-1 (για 11 επιλεγμένα μίγματα σε όλο το εύρος των γραμμομοριακών κλασμάτων της προπανόλης-1, $x_{\text{προπανόλης}} = 0.0 - 1.0$) υπό συνθήκες σταθερής πίεσης και θερμοκρασίας δωματίου (ambient conditions: 298.15 K, 1 Atm) προκειμένου να υπολογισθεί ο γραμμομοριακός όγκος των μιγμάτων αυτών και να μελετηθεί η εξάρτησή του από το γραμμομοριακό κλάσμα της προπανόλης-1. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων θα συγκριθούν απευθείας με πειραματικά αποτελέσματα. Σημειωτέο ότι αντίστοιχη πειραματική άσκησης διεξάγεται επίσης στο εργαστήριο Φυσικοχημείας Ι.