

HCl in Water: krachten en dynamica!

PGO 2006; Mark Somers

In dit project wordt HCl in water bestudeert op een manier zoals jullie nog nooit eerder gedaan hebben. Jullie zullen een model bestuderen en dat gaan testen met behulp van programmeur dat hier in Leiden is ontwikkeld. Tijdens het project zullen jullie antwoord gaan geven op vragen zoals welke krachten er nodig zijn om HCl in water te beschrijven en om de HCl mogelijkerwijs te laten ioniseren. Dit doen jullie als groep, daar geven jullie achteraf een presentatie over en maken jullie een poster over.

Alle informatie die jullie nodig zullen hebben voor dit project is te vinden via de site:

<http://boinc.gorlaeus.net>

Daar vinden jullie links naar uitleg, de benodigde programma's, de benodigde invoerbestanden en kunnen jullie zelfs computers, verspreid over de hele wereld, de rekensommen uit laten voeren.

Om jullie nu niet geheel in het diepe te gooien, hier een puntsgewijze aanpak die jullie de eerste dag voldoende opweg zal helpen:

- Ga naar de bovenstaande site toe en bestudeer **allemaal** de links over Moleculaire Dynamica die daar gegeven worden.
- Lees ook **allemaal** de sites die gaan over krachtenvelden in de Moleculaire Dynamica.
- Lees daarna **allemaal** het eerste gedeelte van de handleiding van het Classical programma dat gaat over het gebruik van het programma. Print dit uit.
- Download het programma voor Windows en de bijbehorende voorbeelden van invoerbestanden. Probeer **allemaal** even een aantal van die simulaties te starten.
- Bestudeer **allemaal** het "hcl_in_water" voorbeeld zorgvuldig! Zorg dat jullie begrijpen wat het model is, kijk welke elementen van krachtenvelden gebruikt worden.
- Maak **allemaal** een account aan op de bovenstaande site zodat jullie invoerbestanden als rekensommen ook via de site op kunnen lossen. Probeer een van de voorbeeld bestanden!

De vraag die jullie in dit project zullen proberen te beantwoorden lijkt eenvoudig;

ioniseert het HCl molecuul in het voorbeeld model?

Vergissen jullie je echter niet in de complexiteit die deze vraag bevat. Een eenvoudige "ja" of "nee" als antwoord is natuurlijk niet voldoende! Bestudeer en bespreek het model en bekijk of HCl volgens het voorbeeld model wel zou **kunnen** ioniseren. Probeer tesamen ook verbeteringen uit te voeren aan het voorbeeld model indien jullie dat nodig achten. Geef redenen en onderbouw deze waarom HCl al dan niet zal gaan ioniseren. Maak daarna een duidelijk plan van aanpak en voer berekeningen uit om jullie ideeën te testen. Kortom, jullie gaan als groep echt onderzoek doen!

In de presentatie die jullie gaan geven en op de poster die jullie moeten maken, moet natuurlijk aandacht besteed worden aan de methodes die jullie gebruikt hebben, aan de ingrediënten van het model (welke componenten zaten er in het krachtenveld en wat betekenen ze afzonderlijk), de numerieke details van jullie simulaties en natuurlijk de resultaten die jullie hebben vergaard. Zorg dat jullie ook een simulatie kunnen laten zien tijdens de presentatie en maak natuurlijk ook gebruik van de plaatjes die jullie in de literatuur links gezien hebben en voor jullie presentatie waarschijnlijk zeer illustratief zullen zijn.

Zorg dat jullie ook antwoorden kunnen geven op vragen zoals hoe jullie water model opgebouwd is, wat de HCl concentratie in jullie model is, wat voor integratie methoden jullie gebruikt hebben voor welke bewegingsvergelijkingen, wat de “minimum system image convention” nu precies is en hoe de temperatuur gecontroleerd wordt tijdens de simulaties. Kortom zorg ervoor dat jullie de dingen die jullie gedaan hebben uit kunnen leggen aan je mede-studenten! Zorg dat jullie *begrijpen* wat jullie gedaan hebben!

Als groep moet dit wel lukken en zouden jullie dit groepsgewijs-zelfstandig aan moeten kunnen pakken, maar uiteraard kunnen jullie altijd de begeleider raadplegen.

Success!