

Q1. 기체상에서 I_2 분자의 H-H 거리가 반응 전 2.7 \AA 에서 광반응 이후 3.3 \AA 으로 변화한다고 가정하자. 이 상황에서 발생하는 이론적 difference scattering intensity, $\Delta S(q)$ 를 Debye equation을 이용하여 계산해보자. $q = 0.01 \sim 8 \text{ \AA}^{-1}$ 범위에서 커브를 출력해보자.

Q2. 기체상에서 I_3 분자의 구조가 반응 전: $r1 = 3.1 \text{ \AA}$, $r2 = 3.3 \text{ \AA}$, 결합각 = 120 deg .에서 광반응 이후: $r1 = 2.7 \text{ \AA}$, $r2 = 2.7 \text{ \AA}$, 결합각 = 180 deg .으로 변화한다고 가정하자. 이 상황에서 발생하는 이론적 difference scattering intensity, $\Delta S(q)$ 를 Debye equation을 이용하여 계산해보자. $q = 0.01 \sim 8 \text{ \AA}^{-1}$ 범위에서 커브를 출력해보자.

Q3. I_2 분자 구조 변화에서 발생하는 $\Delta S(q)$ 로 부터 (“Example#3_I2_deltaS.dat” 파일) I_2 분자 구조 변화를 데이터 피팅을 통해 알아내시오.

Q4. I_3 분자 구조 변화에서 발생하는 $\Delta S(q)$ 로 부터 (“Example#4_I3_deltaS.dat” 파일) I_3 분자 구조 변화를 데이터 피팅을 통해 알아내시오.

Q5. Au3 분자(gold trimer)의 0 fs 부터 5000 fs 까지의 $\Delta S(q, t)$ 로 부터 (“Example#5_Au3_deltaS_time_series.dat” 파일) Au3 분자의 시간에 따른 구조 변화를 데이터 피팅을 통해 알아내시오.

Q6. Q5에서 구한 Au3의 시간에 따른 구조 파라미터 변화를 통해 각 Au 원자의 3차원 x, y, z 좌표를 생성하고 이를 바탕으로 molecular movie를 만드시오. movie를 만드는 방법은 matlab 예제 코드(“pdb_movie_gen.m”) 참고하여 PDB 파일을 만들고, Pymol이라는 프로그램을 설치하면 재생할 수 있음.

Q7. I_3 의 광반응 이후 시간에 따른 $\Delta S(q, t)$ data가 “Example#7_I3_for_reaction_mechanism.dat” 파일에 들어있다. 데이터를 참고하여 I_3 의

반응중간체의 개수를 알아내고 시간상수를 구하여 kinetic model을 알아내시오. (singular value decomposition을 이용하시오.)

Q8. 위의 데이터를 이용하여 각 반응중간체의 고유한 회절 신호(species-associated difference scattering curve)를 구하고, 이를 이용하여 반응중간체의 삼차원 구조를 알아내시오. (scaling factor는 1로 고정) kinetic model과 반응중간체 구조를 종합하여 반응 메커니즘을 규명하시오.