

Zkušební otázky předmětu Pokročilé simulace ve fyzice mnoha částic TMF024, 2022/2023

1. Elektrostatické interakce – alternativy k fixním bodovým nábojům, polarizovatelné modely.
2. Elektrostatické interakce – metoda reakčního pole, Ewaldova sumace (princip metody, volba optimálních parametrů).
3. Grandkanonický, Gibbsův a reakční soubor, měření chemického potenciálu.
4. Výpočet transportních veličin z rovnovážné molekulární dynamiky. Určování difuzivity a viskozity.
5. Teorie lineární odezvy, aplikace v simulacích. Výpočet transportních veličin z nerovnovážné molekulární dynamiky.
6. Modelování vnitřních stupňů volnosti molekul, tuhé vs. flexibilní molekuly. Simulace tuhých molekul – rotace v MC a MD, algoritmus SHAKE zachovávající délky vazeb.
7. Variační a difúzní Monte Carlo metoda pro určení energie základní stavu kvantového systému.
8. Teorie funkcionalu hustoty (DFT), Kohnova-Shamova rovnice. Carova-Parrinellova metoda.