

Zkušební otázky předmětu Pokročilé simulace ve fyzice mnoha částic NTMF024, 2024/2025

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. Variační a difúzní Monte Carlo metoda pro určení energie základní stavu kvantového systému.
7. Teorie funkcionalu hustoty (DFT), Kohnova-Shamova rovnice.