

Metody KMS

Podstawowa literatura:

- D.W.Heermann, *Podstawy symulacji komputerowych w fizyce*, WNT, Warszawa, 1997.
- Robert Kosiński, *Wprowadzenie do mechaniki kwantowej i fizyki statystycznej*, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2006.
- Wybrany podręcznik z podstaw molekularnej mechaniki kwantowej/chemii kwantowej.
- A.R.Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2nd Edition), Prentice Hall; ISBN: 0582382106, 2001.
- B. Lesyng, notatki. <http://kms.bioexploratorium.pl/>

Przykładowe pytania:

1. Jakie korzyści płyną z przybliżenia Borna Oppenheimera dla wykonywania praktycznych symulacji układów atomowych i molekularnych ?
2. Jak otrzymuje się powierzchnie energii potencjalnej w elektronowym stanie podstawowym i w stanach wzbudzonych ?
3. Jaki jest związek wieloelektronowej funkcji falowej i rozkładu gęstości elektronowej. ?
4. Jaki jest związek molekularnego, mikroskopowego potencjału elektrostatycznego i rozkładu gęstości elektronowej ?
5. Co to jest mechaniczny model układów molekularnych ?
6. Objąć wkłady energetyczne oddziaływań atom-atom w potencjale Lennarda-Jonesa.
7. Znać i rozumieć omawiane lokalne metody poszukiwania minimum energii potencjalnej (metoda najszybszego spadku i metoda Newtona-Raphsona).
8. Umieć opisać przynajmniej jedną z globalnych metod poszukiwania minimum energii potencjalnej.
9. Umieć wyprowadzać omawiane algorytmy klasycznej dynamiki molekularnej (Verlet, żabi skok (*leap-frog*), *velocity-Verlet*).
10. Wyprowadzić wybrany algorytm kwantowej dynamiki molekularnej.
11. Opisać formalizm badania stabilności algorytmów klasycznej dynamiki molekularnej.
12. Zbadać stabilność wybranego algorytmu klasycznej dynamiki molekularnej.
13. Opisać algorytm SHAKE uwzględniania wiązań dotyczących ustalenia długości wiązań między atomami w ramach formalizmu MD żabiego skoku.
14. Opisać podstawy matematyczne metod Monte Carlo ? Czemu służą te metody ?
15. Opisać zastosowania wybranej metody Monte Carlo w fizyce statystycznej do wyznaczania średnich po zespole ($N, T, V = \text{const}$). Sformułować algorytm Metropolisa.
16. Co to jest średnia energia oraz energia swobodna w zespole statystycznym ($N, T, V = \text{const}$) ? Podać i zinterpretować odpowiednie wzory.
17. Wyprowadzić wzór na energię swobodną w zespole NVT wykorzystywany w symulacjach.
18. Na czym polegają periodyczne warunki brzegowe w symulacjach MM i MC i dlaczego stosuje się te warunki ?
19. Podać wzór na stałą równowagi i wyjaśnić wielkości w nim występujące. Jakie są jednostki tych wielkości ? Posłużyć się przykładem potencjału bistabilnego.
20. Co to jest metoda alchemii komputerowej ? Jakie są jej zastosowania ?
21. Opisać wybrany przykład dotyczący ciekawszych, praktycznych zastosowań symulacji komputerowych.