

POŽADAVKY KE STÁTNÍ ZÁVĚREČNÉ ZKOUŠCE pro NAVAZUJÍCÍ MAGISTERSKÉ STUDIUM „POČÍTAČOVÉ MODELOVÁNÍ VE VĚDĚ A TECHNICE”

Organizace zkoušky

Zkouška je ústní a má dvě části:

1. Počítačová fyzika
2. Fyzika

Každému studentovi budou zadány v každé z uvedených částí dvě hlavní otázky. Student má nárok na minimálně 40 minut času k přípravě na zkoušku. Členové komise mohou k doplnění představy o vědomostech studenta položit v rámci zvolených okruhů doplňující dílčí otázky menšího rozsahu, na které již student odpovídá bez přípravy.

1. Počítačová fyzika

Metoda Monte Carlo: princip metody, základní pojmy (diskrétní a spojitá náhodná veličina a jejich základní charakteristiky), generování a transformace náhodných veličin, využití metody Monte Carlo v numerické matematice, Metropolisův algoritmus, příklady použití metody Monte Carlo ve fyzice (Laplaceova rovnice, Isingův model feromagnetik, transportní problém, částicové simulace).

Molekulární dynamika: princip metody, základní algoritmy (Eulerův, Verletův a Rychlostní Verletův algoritmus) včetně případného zohlednění rychlostně závislé síly, souvislost celkové potenciální energie a sil působících na jednotlivé částice.

Obecné problémy částicového modelování termodynamických soustav: okrajové, počáteční a termodynamické podmínky, krátkodosahové a dlouhodosahové interakce a metody jejich řešení (korekce na „uříznutí“ potenciálu, Ewaldova sumace, reakční pole).

Měření veličin v molekulárních simulacích: mechanické, strukturní a entropické veličiny.

Molekulární simulace v různých statistických souborech: termostaty a barostaty v molekulární dynamice, Metropolisův algoritmus v izobarizko-izotermickém a grandkanonickém souboru.

Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic: obecný princip metod, metody Rungeho-Kutty, metody prediktor-korektor. Stiff soustavy a jejich řešení.

Numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic: obecný princip metod sítí, principy metod konečných diferencí, objemů a prvků.

Příklady parciálních diferenciálních rovnic ve fyzice a jejich numerické řešení: rovnice Poissonova, rovnice vedení tepla a kmitání struny.

2. Fyzika

Předpokládá se, že posluchač zná zavedení základních a odvozených fyzikálních veličin, jejich jednotky, přibližnou číselnou hodnotu základních fyzikálních konstant. Posluchač má prokázat porozumění základním zákonům a teoriím fyzikálních jevů a jejich vzájemným souvislostem.

Teorie elektromagnetického pole

Elektrostatické pole ve vakuu a látkovém prostředí: základní rovnice a jejich řešení, multipólový rozvoj, materiálové vztahy, energie pole, hraniční podmínky.

Stacionární magnetická pole: základní vztahy, rovnice a jejich řešení – Biotův a Savartův zákon, energie, hraniční podmínky.

Obecná soustava Maxwellových rovnic a jejich fyzikální interpretace. Materiálové vztahy a okrajové podmínky pro veličiny elektromagnetického pole.

Zákony zachování v teorii elektromagnetického pole.

Řešení soustavy Maxwellových rovnic pro nestacionární pole: potenciály elektromagnetického pole, rovinná a kulová elektromagnetická vlna a její šíření, Fresnelovy vzorce, superpozice a retardace řešení.

Vyzařování soustav, dipólové záření.

Statistická fyzika

Základní pojmy a postuláty statistické fyziky: mikroskopický stav, fázový prostor, statistický soubor, vztah mikroskopických a makroskopických vlastností, ergodická hypotéza, pravděpodobnost mikroskopických stavů mikrokanonického souboru.

Kanonický soubor: kanonické rozdělení, dominance nejpravděpodobnějšího rozdělení. Souvislost kanonické partiční funkce s termodynamickými vlastnostmi, entropie v kanonickém a mikrokanonickém souboru.

Kvaziklasická aproximace: souvislost s Heisenbergovým principem neurčitosti, podmínky platnosti, příklady použití, ekvipartiční teorém.

Klasický ideální plyn: termická stavová rovnice, Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení rychlostí, barometrická formule.

Kalorická stavová rovnice dvouatomárního ideálního plynu: translační, rotační, vibrační, elektronové příspěvky k tepelné kapacitě plynů.

Ideální krystal: tepelné kapacity klasického modelu, Einsteinova modelu, Debyeova modelu.

Kvantové ideální plyny: Boseho-Einsteinovo a Fermiho-Diracovo statistické rozdělení. Záření absolutně černého tělesa.

Reálné plyny: viriální rozvoj, druhý viriální koeficient.

Kvantová fyzika

Experimentální základy, myšlenková východiska a postuláty kvantové fyziky. Schrödingerova rovnice, pravděpodobnostní proudová hustota. Komutativnost operátoru a měřitelnost veličin, relace neurčitosti.

Operátor časové změny, kvantově-mechanické pohybové rovnice (I. a II. Ehrenfestův teorém).

Stacionární stavy, nečasová Schrödingerova rovnice. Řešení jednoduchých stacionárních úloh (potenciálová stěna, val a krabice).

Lineární harmonický oscilátor (formulace problému, výsledky, porovnání s klasickou fyzikou).

Moment hybnosti (vlastní hodnoty a funkce, kreační a anihilační operátory stavů). Pohyb v centrálním poli. Schrödingerův model atomu vodíku. Atom ve vnějším magnetickém poli.

Popis systému mnoha částic. Princip nerozlišitelnosti mikročástic. Symetrie vlnové funkce. Pauliho princip.

Základy poruchového počtu (stacionární porucha s nedegenerovaným spektrem).