

Magisterki

Tematy prac magisterskich IF UMK

Część tematów umieszczona jest w USOS'ie. Liczba miejsc ograniczona.

Przed wyborem tematu konieczny kontakt ze mną.

Niektóre tematy można zacząć realizować wcześniej (np. będąc na niższym roku)

Niektóre tematy magisterskie mogą być realizowane jako inżynierskie i odwrotnie
 1. Wbudowanie poprawnej asymptotyki w metodzie funkcjonałów gęstości (DFT). Praca z zakresu mechaniki i chemii kwantowej. Konieczna umiejętność programowania w FORTRANie lub przynajmniej w C. Możliwość kontynuacji na studiach doktoranckich. NEW!!!

2. Zastosowanie metody sprzężonych klasterów (CC) opartej na orbitalach DFT (OEPx) do układów z kwazidegeneracją. Typowa "obliczeniówka" z elementami programowania. Wykonanie konkretnych obliczeń (także modyfikacje w kodzie programu) metodami uwzględniającymi korelację elektronową - metody CC dla orbitali otrzymanych w ramach metody OEPx. Możliwość kontynuacji na studiach doktoranckich. NEW!!!

3. Wdrożenie systemu do obliczeń kwantowo-chemicznych - ACES II. Uruchomienie systemu do obliczeń kwantowo-chemicznych ACES II na lokalnej maszynie LINUX i wykonanie konkretnych obliczeń (także modyfikacje w kodzie programu) dla kilku ważnych układów atomowo-molekularnych. NEW!!!

4. Analiza i zastosowanie wielociałowego rachunku zaburzeń drugiego rzędu (MBPT2) do obliczania energii korelacji w teorii funkcjonałów gęstości - DFT. Typowa "obliczeniówka" z elementami programowania. Wykonanie konkretnych obliczeń (także modyfikacje w kodzie programu) metodami uwzględniającymi korelację elektronową - metody MBPT(2) dla orbitali otrzymanych w ramach metody OEPx. Możliwość kontynuacji na studiach doktoranckich. NEW!!!

5. NEW!!!

6. Wirtualny spacer po Instytucie Fizyki UMK. Dowolne narzędzie. Efektowna aplikacja pozwalająca na wirtualne zwiedzanie i poruszanie się po IF - pomyślana także jako przewodnik (mapa) po IF - kontynuacja NEW!!!

7.

. Ciekawe, własne propozycje studentów są też do zaakceptowania. Zakres - teoria układów wieloelektronowych, teorie funkcji falowych, teorie funkcjonałów gęstości oraz ich zastosowania. Ale także: bezpieczeństwo systemów informatycznych, komputerowe symulacje praw i zagadnień fizycznych, tworzenie oprogramowania użytkowego. Tematy zakończone

Wdrożenie, implementacja i rozwój TCE - Tensor Contraction Engine.
 Analiza efektywności metody OEP.