

Pytania egzaminacyjne do wykładu z „metod symulacji w nanotechnologii”

1. Opisz krótko metodę gradientu prostego.
2. Napisz krótko czym różni się metoda gradientu prostego od metody największego spadku.
3. Napisz krótko czym różni się metoda największego spadku od metody gradientów sprzężonych.
4. Czym różni się problem znajdowania minimum lokalnego od minimum globalnego?
5. Napisz krótko czym różnią się odkształcenia od naprężeń oraz co to są odkształcenia hydrostatyczne?
6. Omów krótko czym jest niedopasowanie sieciowo i jakie to ma konsekwencje dla samorosnących kropek kwantowych?
7. Funkcja falowa opisująca stan kwantowy pewnej cząstki, poruszającej się w jednym wymiarze (x) ma postać $\Psi(x, t)$. Co w mechanice kwantowej reprezentuje wielkość: $\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx$?
8. Równanie Schrödingera zależne od czasu. Nazwij i wyjaśnij wszystkie symbole.
9. Rozpisz macierz hamiltonianu w metodzie ciasnego wiązania (TB) w przybliżeniu najbliższych sąsiadów dla zadanej struktury periodycznej (nanorurki węglowej lub wstęgi grafenowej).
10. Twierdzenie Blocha, czyli jaki warunek musi spełniać funkcja falowa $\psi(x)$, opisująca stan cząstki w jednym wymiarze (funkcja zależy tylko od zmiennej x) w periodycznym potencjale o okresie periodyczności " d ". Jaka wielkość „numeruje” stany cząstki?
11. Z jakich orbitali atomowych i w jaki sposób tworzy się orbitale zhybrydowane wyjaśniające wiązanie odpowiedzialne za trwałość grafenu.

12. Nanorurki węglowe identyfikuje się za pomocą dwóch liczb naturalnych (n,m). Co oznaczają te liczby? Jakie są podstawowe typy nanorurek węglowych i czym się charakteryzują?
13. Co to jest stan rezonansowy?
14. Jaka jest interpretacja zespolonej energii rezonansu?
15. Co to znaczy, że rezonans ma określoną szerokość?
16. Co to jest średni czas życia rezonansu i jaki jest jego związek z szerokością rezonansu?
17. Na czym polega zastosowanie metody stabilizacji do określania energii i szerokości rezonansu?
18. Czym różnią się stany rezonansowe od związanych i niezwiązanych?
19. Podaj podstawowe równanie klasycznej dynamiki molekularnej, opisz jaki ma charakter matematyczny, podaj jeden z algorytmów całkowania tego równania stosowany w modelowaniu komputerowym nanostuktur.
20. Podaj przykład wykorzystania metod symulacji komputerowych do badania właściwości bionanomateriałów.
21. Wyprowadź algorytm Verleta całkowania równania Newtona stosowany w symulacjach dynamiki molekularnej.
22. Porównaj modelowanie klasyczne i kwantowe nanoukładów (wady i zalety każdego z podejść, podaj nazwy głównych metod)
23. Jakie znaczenie biznesowe może mieć modelowanie komputerowe bionanoukładów?
24. Wymień po 3 zalety stosowania grafiki komputerowej i technologii bazodanowych w modelowaniu biomolekuł
25. Opisać ewolucję swobodna gaussowskiego pakietu falowego. Podać postać pakietu, określić sens fizyczny sens użytych parametrów. Jakim zmianom ulega pakiet w trakcie ewolucji i od jakich parametrów fizycznych te zmiany zależą?

26. Omówić zasadę nieoznaczoności Heisenberga. Jak się ona przejawia w przypadku ewolucji swobodnej pakietu gaussowskiego?
27. Opisać istotę i najważniejsze cechy zjawiska kwantowego tunelowania przez pojedynczą barierę potencjału. Czym różni się ono od klasycznego pokonywania bariery potencjału?
28. Opisać proces tunelowania przez podwójną barierę potencjału. Jaką rolę odgrywają w nim stany rezonansowe?
29. Opisać istotę (podać ogólne wzory) metody Cranka-Nicholson całkowania równania Schrödingera dla układu opisanego hamiltonianem H .
30. Opisać istotę (podać ogólne wzory) metody rozszczepienia czasu (time-splitting) całkowania równania Schrödingera dla układu opisanego hamiltonianem H .