

Propozycje tematów prac magisterskich dla specjalności FK i IS

Wszystkie proponowane tematy dotyczą komputerowego modelowania nanostruktur (molekuł, kompleksów, klasterów) i procesów w nich/między nimi zachodzących, metodami mechaniki kwantowej. Wymagają one opanowania podstaw mechaniki kwantowej układów wieloatomowych i techniki pracy na uniwersalnych programach obliczeniowych dostępnych w ośrodku toruńskim (Gaussian, Gamess, Molden itp.). Można to najlepiej zrobić uczestnicząc w moim wykładzie monograficznym **Metody komputerowe w modelowaniu nanostruktur** i związanej z nim **pracowni specjalistycznej** (w semestrze letnim, występują w siatce FK). Osoby, które nie przechodziły tego cyklu zajęć na roku przed-dyplomowym mogą też być zaakceptowane, jednak będą musiały opanować dużo materiału samodzielnie; przewidziana jest pomoc techniczna przy prowadzeniu obliczeń (dr Zelek, mgr Misztal). Tematy mają charakter aplikacyjny, w zasadzie nie są związane z tworzeniem oprogramowania. Stosowane będą metody Hartree-Focka, funkcjonałów gęstości (DFT, różne warianty), rachunku zaburzeń Moellera-Plesseta 2. rzędu (MP2)

- Modelowanie klasterów wody i procesów dysocjacji elektrolitycznej
- Modelowanie potencjału działającego na proton w mostku wodorowym
- Modelowanie potencjału układów wiązań wodorowych w parach zasad nukleotydowych: adenina-tymina i/lub guanina-cytosyna (2 odrębne tematy)
- Modelowanie elementarnych procesów w katalizatorze samochodowym: dysocjacja CO, NO na sieci atomów Rh
- Modelowanie geometrii i widm oscylacyjnych tlenków typu A_2O_2 (z uwzględnieniem efektów anharmonicznych)
- Ewolucja basenów atomowych w przemianach konformacyjnych układu – analiza *Atoms In Molecules* (AIM) na wybranych przykładach
- Modelowanie wzrostu przestrzennych struktur węglowych (fullereny, nanorurki) w ramach poszerzonej iteracyjnej metody Hückela (EIHM) i modelu nakrywania kąтового (prosta teoria, sporo programowania); temat ten, w zależności od poziomu dyplomanta, może być realizowany jako magisterski, inżynierski lub licencjacki

Propozycje tematów prac dyplomowych inżynierskich dla studiów zawodowych IS

Grupa tematów z mechaniki i optyki geometrycznej; przygotowanie merytoryczne na podstawie odpowiednich działów kursu fizyki ogólnej jest wystarczające. Istotnym aspektem wszystkich tematów jest wizualizacja zjawiska, w wypadku ruchu – możliwie w czasie rzeczywistym (ewentualnie skalowanym, niezależnym od zegara procesora); zalecany system programowania: Delphi, jednak może być także C++, C# - do uznania studenta, musi jednak być samodzielnie opanowany.

seria: **Komputerowe modelowanie ruchu:**

Zagadnienia o charakterze dynamicznym: wymagają całkowania równań ruchu (Newtona, Lagrange’a lub Hamiltona); podstawowy algorytm Rungego-Kutty 4. rzędu (RK4) jest wystarczający

- Skoki narciarskie (z uwzględnieniem sił: oporu, tarcia, nośnej)

Skok ma 2 fazy: rozbieg i lot. Rozbieg jest ruchem jednowymiarowym – podlega więzom określonym przez profil rozbiegu skoczni; do opisu najlepiej jest zastosować równanie Lagrange’a II rodzaju dla przypadku sił niepotencjalnych (tarcie i opór powietrza). Lot jest ruchem 2-wymiarowym, właściwe są tu równania Newtona z uwzględnieniem oporu powietrza; siła nośna może być modelowana na podstawie różnicy długości dróg opływu nad skoczkiem i pod nim; wskazane będzie prześledzenie aktualnych przepisów sportowych i utworzenie małej bazy danych geometrycznych dla konkretnych skoczni.

- Rzut na obracającej się Ziemi (uwzględnienie siły Coriolisa w ruchu pocisków i rakiet)

Chodzi o ruchy pocisku (duża prędkość startowa) lub rakiety (punkt o zmiennej masie, ewentualnie sterowany) o zasięgu co najmniej 100 km, z dużymi prędkościami, także naddźwiękowymi, opisywane we współrzędnych geograficznych. Problem można sformułować jako całkowanie układu równań Newtona we współrzędnych krzywoliniowych, z centralnym potencjałem grawitacyjnym (przyspieszenie ziemskie zależne od wysokości): w układzie lokalnym, związanym z punktem (np. startu) na obracającej się Ziemi – a więc nieinercyjnym, z jawnym uwzględnieniem siły Coriolisa; lub w układzie inercyjnym związanym ze środkiem Ziemi. Opór powietrza wymaga uwzględnienia określonego modelu termodynamicznego dla atmosfery. Tor powinien być prezentowany na wybranej siatce kartograficznej (np. Mercatora).

- Układy sprzężonych oscylatorów

Sprzężone oscylatory harmoniczne, ewentualnie podlegające określonym siłom tłumienia i wymuszania, to bardzo szeroko stosowany w fizyce i technice model (np. układy wahadeł, sprężyn, oscylacje molekuł, wpływ drgań (w tym trzęsień ziemi) na konstrukcje itp.). W ramach takiego modelowania rozważa się układ punktów masywnych, połączonych wiązaniami o określonych stałych siłowych („pole siłowe”) i ewentualnie stałych tłumienia; do wybranych punktów mogą być przyłożone periodyczne siły wymuszające. Równania ruchu (Newtona lub Hamiltona) można sformułować w 1, 2 lub 3 wymiarach, co w przypadku

czystych sił harmonicznych prowadzi do zagadnienia na wartości i wektory własne macierzy, określające stany własne układu (częstości charakterystyczne, drgania normalne)

- Misja księżycowa

Satelita (punkt materialny, bez napędu) „parkuje” (z 1. prędkością kosmiczną) na ustalonej orbicie wokół Ziemi, w płaszczyźnie orbity Księżyca. Z orbity tej startuje z określoną prędkością w kierunku Księżyca, okrąża go i wraca; trzeba przeprowadzić całkowanie równań Newtona lub Hamiltona w 2 wymiarach, w inercjalnym układzie o początku w centrum Ziemi lub w środku masy Ziemia-Księżyc; wpływ Słońca pominięty. W bardziej ambitnym wariacie orbita „parkowania” może być dowolna, można także uwzględnić wpływ Słońca – oznacza to problem w 3 wymiarach.

- Misja na sąsiednią planetę

Satelita (punkt materialny, bez napędu) „parkuje” (z 1. prędkością kosmiczną) na ustalonej orbicie wokół Ziemi, w płaszczyźnie ekliptyki. Z tej orbity startuje z określoną prędkością w celu dotarcia do sąsiedniej planety (Mars lub Wenus) pod wpływem grawitacji Słońca. Całkowanie równań Newtona lub Hamiltona w 2 wymiarach, w inercjalnym układzie o początku na Słońcu; wpływ Księżyca pominięty.

- Elektron w polu siły Lorentza

Modelowanie takich urządzeń jak cyklotron, soczewka elektromagnetyczna itp.: ruch elektronu (w bardziej ambitnej wersji – relatywistycznego) w układzie pól elektrycznego i magnetycznego, niekoniecznie jednorodnych, w bardziej ambitnym wariacie – zmiennych w czasie. Całkowanie układu równań Newtona w 3 wymiarach.

Zagadnienia o charakterze kinematycznym: nie wymagają całkowania równań ruchu, a jedynie wyznaczania toru.

- Reakcja jachtu żaglowego na wiatr

(rekomendowany dla osoby posiadającej doświadczenie żeglarskie)

W najprostszym modelu, uwzględniającym tylko kinematykę, o ogólnych cechach nautycznych jachtu decyduje wzajemne usytuowanie środka ożaglowania i środka oporu bocznego. Jednak opór, jakiego kadłub doznaje od strony wody ma charakter tensorowy, zmienny jeśli jacht ma miec o zmiennej powierzchni. W wypadku kursów „ostrych” względem wiatru na żaglu powstaje też siła nośna. W bardziej zaawansowanej symulacji 3D wszystkie te czynniki (parcie wiatru na żagiel, siła nośna, współczynniki oporu hydrodynamicznego) zmieniają się pod wpływem przechyłu. Celem symulacji jest wizualizacja relacji wektorowych występujących w ruchu jachtu.

- Globalny system pozycjonowania

Global Positioning System (GPS) to kilkanaście satelitów krążących po orbitach na wysokości ok. 20000 km (pół-dobowych) rozłożonych tak, żeby w każdej chwili, w każdym punkcie Ziemi widoczne na horyzoncie były co najmniej cztery z nich; satelity wysyłają synchronicznie sygnały umożliwiające ich identyfikację. Wyznaczenie pozycji odbiornika

wymaga formalnie rozwiązania układu 4 równań linowych, w równaniach tych konieczne jest jednak uwzględnienie efektów relatywistycznych.

seria: **Komputerowe modelowanie układów optycznych**

W tych projektach chodzi o wizualizację przebiegu wiązki promieni o różnych barwach (z uwzględnieniem zjawiska dyspersji) przez różne układy optyczne, na ogół osiowo symetryczne (modelowanie w 2 wymiarach), i przedstawienie (ewentualnie minimalizowanie) ich wad optycznych. Wystarczający jest kurs optyki geometrycznej w ramach fizyki ogólnej (a nawet – szkolnej)

- Obiektyw mikroskopu z wykorzystaniem soczewek asferycznych

Obiektyw mikroskopu jest układem silnie skupiającym, z najczęściej płaską powierzchnią wejściową. Wiązka przedmiotowa jest silnie rozbieżna, co powoduje duże wady optyczne odwzorowania. Jedną z możliwości korygowania tych wad jest zastosowanie soczewek asferycznych, w których powierzchniami łamiącymi są dowolne kwadryki osiowo-symetryczne.

- Optymalizacja układu teleskopowego

Układ teleskopowy to układ optyczny, który przekształca wiązkę równoległą w równoległą, zmieniając jej przekrój (ale nie ogniskując). Układ taki jest elementem wejściowym wszystkich nowoczesnych obiektywów zmiennoogniskowych, składa się z (co najmniej) trzech członów: skrajnych – skupiających i środkowego – rozpraszającego; człon środkowy i skrajny (przedmiotowy lub – częściej – obrazowy) poruszają się w sposób zsynchronizowany, dzięki czemu następuje zwężanie lub rozszerzanie wiązki – efekt „zoomowania”. Optymalizacja ma dotyczyć redukcji głównych aberracji układu, a także analizy przechodzenia wiązek ukośnych.

- Soczewki Fresnela i ich układy

Są to na ogół dużych rozmiarów, ale względnie cienkie soczewki, składające się z koncentrycznych pierścieni będących fragmentami „pełnej” soczewki. W tym wypadku chodzi przede wszystkim o analizę wad optycznych takich układów.

- Układy soczewek i zwierciadeł płaskich

Są to układy, w których wiązka skupiona przez obiektyw jest odwracana przez układ zwierciadeł (częściej – pryzmatów całkowicie odbijających) i kierowana do okularu; w tym wypadku modelowanie przebiegu wiązki musi być trójwymiarowe. Szeroko znanymi konstrukcjami tego typu są lunety Newtona (odwracające), w których uzyskuje się obraz prosty dzięki układom zwierciadeł: lornetka pryzmatyczna, pryzmat pentagonalny (stosowany np. w aparatach fotograficznych z celownikiem „through lens”).

Tematy związane z uproszczonymi metodami mechaniki kwantowej

(mogą być także tematami licencjackimi, ale konieczna jest wprawa w programowaniu)

- Iteracyjna metoda Hückela

(zob. np. A. Gołębiewski, *Chemia kwantowa związków organicznych*, rozdział VI). Jest to skrajnie uproszczona, ale mimo to ciągle użyteczna i wykorzystywana metoda opisu układów wiązań sprzężonych w cząsteczkach organicznych (takich jak np. benzen, naftalen, także zawierających heteroatomy (N, O)) oparta na mechanice kwantowej, bardzo prosta do zrozumienia i zaprogramowania. Istotnymi elementami programu będą:

- macierzowy, możliwie zautomatyzowany zapis wzoru strukturalnego cząsteczki
- wizualizacja struktury przestrzennej jedno-elektronowych funkcji falowych
- generowanie diagramów molekularnych.

Zbudowany program zostanie następnie zastosowany do konkretnego zagadnienia.

Temat może być podjęty przez zespół 2-osobowy, w takim wypadku program będzie pisany wspólnie, ale każda z osób będzie pisała inny blok funkcyjny i modelowała inny układ chemiczny.

- Poszerzona iteracyjna metoda Hückela (EIHM)

(zob. np. A. Gołębiewski, *Chemia kwantowa związków organicznych*, rozdział VI). Jest to mocno uproszczona, ale mimo to bardzo użyteczna metoda opisu układów wieloatomowych, oparta na mechanice kwantowej, prosta do zrozumienia i zaprogramowania (w wariacie ograniczonym do atomów grup głównych). Napisany program zastosowany może być np. do modelowania wzrostu przestrzennych struktur węglowych (fullereny, nanorurki) w ramach modelu nakrywania kąтового.

Tematy licencjackie - referatowe

- Opis oscylacji cząsteczki 2-atomowej – wyjście poza przybliżenie harmoniczne

Porównanie kilku analitycznie rozwiązywalnych w ramach mechaniki kwantowej modeli oscylacji realnej cząsteczki 2-atomowej, np. potencjałów Morse'a, Simonsa-Finlana-Parra; w bardziej ambitnej wersji z uwzględnieniem sprzężenia oscylacji i rotacji

- Symetria cząsteczki a jej stany oscylacyjne

Stany oscylacyjne układu masywnych punktów i związane z nimi współrzędne normalne drgań można klasyfikować ze względu na symetrię, i wyprowadzać stąd reguły wyboru dla przejść obserwowanych w podczerwieni lub widmach Ramana. Trzeba trochę poczytać o podstawach spektroskopii molekularnej i teorii grup punktowych

- Stany oscylacyjno-rotacyjne małych cząsteczek

Jeżeli kilkuatomowa cząsteczka wykazuje jakieś elementy symetrii przestrzennej, to wpływa to w istotny sposób na kształt jej widma oscylacyjno-rotacyjnego. Trzeba trochę poczytać o podstawach spektroskopii molekularnej i teorii grup punktowych

- Konfiguracja elektronowa układu (atomu, cząsteczki) a wieloelektronowa funkcja falowa

Referat na poziomie ćwiczeń z Fizyki Kwantowej II, dotyczący istotnych własności wyznaczników Slatera, działań na wyznacznikach, budowania funkcji własnych całkowitego spinu N elektronów.