

Obsah

Předmluva	8
1 Úvod	9
1.1 Statistická fyzika a simulace	9
1.2 Historický přehled	11
2 Základní pojmy a definice	13
2.1 Statistické soubory	14
2.1.1 Klasické systémy	14
2.1.2 Kvantové systémy	17
2.2 Modelové systémy	18
2.2.1 Klasický spojitý systém	18
2.2.2 Kvantový spojitý systém	21
2.2.3 Klasické mřížkové modely	22
2.2.4 Kvantové mřížkové modely	24
2.2.5 Optimalizační úlohy	25
3 Základy molekulární dynamiky	27
3.1 Pohybové rovnice a metoda konečných diferencí	27
3.1.1 Verletova metoda	30
3.1.2 Gearovy integrátory	31
3.2 Volba integrátoru a integrační krok	33
4 Základy metody Monte Carlo	37
4.1 Úvodní poznámky	37
4.2 Boltzmannovské vzorkování	39
4.2.1 Markovovy řetězce	39
4.2.2 Určení matice přechodu	42
4.2.3 Zkušební změna konfigurace	43
4.2.4 Realizace kroku Metropolisovy metody	45
4.3 Zlomek přijetí a nastavení parametrů	46
5 Realizace pseudoexperimentu	51
5.1 Volba metody a souboru	51
5.2 Technické detaily	52
5.2.1 Okrajové podmínky	52

5.2.2	Velikost systému a dosah potenciálu	55
5.2.3	Dlouhodobé síly	57
5.2.4	Start	58
5.3	Měření	59
5.3.1	Makroskopické mechanické veličiny	60
5.3.2	Makroskopické entropické veličiny	63
5.3.3	Strukturní a pomocné veličiny	66
5.3.4	Odhad chyb	71
6	Simulace v jiných souborech	73
6.1	MC simulace	73
6.1.1	NPT soubor	73
6.1.2	Grandkanonický soubor	74
6.1.3	Mikrokanonický soubor	76
6.1.4	Fázové rovnováhy a Gibbsův soubor	76
6.1.5	Reakční soubor	80
6.2	MD metody při konstantní teplotě	82
6.2.1	Přibližný kanonický soubor	83
6.2.2	Přesný kanonický soubor	84
6.3	Metoda umělých stupňů volnosti v MD	84
6.3.1	Simulace při konstantním tlaku	84
6.3.2	Noséův-Hooverův termostat	86
7	Speciální metody	91
7.1	Nesymetrická matice α	91
7.1.1	Force bias	92
7.1.2	Preferenční vzorkování	92
7.2	Neboltzmannovské vzorkování	94
7.3	Metoda fluktuující částice	96
7.4	Dlouhodobé síly	97
7.4.1	Ewaldova-Kornfeldova sumace	97
7.4.2	Metoda reakčního pole	100
7.4.3	Rychlý multipólový rozvoj	100
7.4.4	Výpočet permitivity	101
7.5	Simulace molekulárních systémů	102
7.5.1	Tuhé molekuly	103
7.5.2	Molekuly s vnitřními stupni volnosti	104
8	Kinetické veličiny a časově závislé systémy	111
8.1	Kinetické koeficienty v MD	111
8.1.1	Základní vztahy	113
8.1.2	Rovnovážné metody	116
8.1.3	Nerovnovážná molekulární dynamika (NEMD)	117
8.2	Kinetické Monte Carlo	118
8.2.1	Rovnovážné versus kinetické modely	118

8.2.2	Algoritmy pro kinetické MC	121
8.2.3	Čas v kinetickém MC	124
9	Kvantové simulace	127
9.1	Kvantové korekce	128
9.2	Variační metoda	129
9.3	Simulace při konečné teplotě	131
9.3.1	Princip metody	131
9.3.2	Izomorfismus kvantových a klasických systémů	133
9.3.3	Fermionové systémy	137
9.3.4	Znaménkový problém	138
9.4	<i>Ab initio</i> simulace	139
9.4.1	Funkcionál hustoty	140
9.4.2	Metoda MD Cara a Parrinella	142
10	Dodatky	145
10.1	Jazyk algoritmů	145
10.2	Náhodná čísla	145
10.2.1	Základní algoritmy	146
10.2.2	Jiná rozložení	149
10.3	Kvaterniony a kinematika tuhého tělesa	152
10.4	Gearovy integrátory a stabilita	153
10.5	Analýza časové řady a odhad chyb	155
10.6	Redukované jednotky	157
10.7	Problémy ke studiu	158
	Seznam symbolů a zkratek	163
	Literatura	166