

### Metody obliczeniowe w projektowaniu nowych materiałów

Wykładowca: **dr Tadeusz Pluta**

---

#### **Treści merytoryczne:**

Podstawowe pojęcia: modelowanie i symulacje numeryczne w nauce o materiałach. Metoda Monte Carlo: podstawy, rys historyczny, podstawowe zastosowania. Algorytm Metropolis dla zespołu kanonicznego oraz mikrokanonicznego. Metoda Monte Carlo dla układu spinów: modele Isinga i Heisenberga. Dynamika molekularna: modele potencjałów międzyatomowych, potencjały typu ciasnego wiązania (tight-binding), całkowanie równań ruchu, warunki graniczne. Teoria funkcjonalów gęstości (DFT): równania Kohna-Shama, typy funkcjonalów: lokalne, gradientowe i hybrydowe, zalety metod DFT w nauce o materiałach. Obliczenia równoległe: skalowanie się algorytmu, współczesne strategie obliczeniowe dla układów o dużej liczbie atomów. Obliczenia numeryczne dla nanorurek węglowych: materiały węglowe, struktura fulerenów i nanorurek, obliczenia tight-binding, geometria i struktura elektronowa nanorurek, pasma energetyczne, spektroskopia Ramana i własności elastyczne nanorurek. Organiczne materiały w optyce nieliniowej (NLO): nieliniowe własności optyczne w skali makro i mikro, optymalne parametry dla materiałów NLO, architektura molekularna typu donor-mostek-akceptor, polieny i polieny w zastosowaniu NLO, cząsteczki oktapolarne dla zastosowań NLO. Wyznaczanie składowych tensorów hiperpolaryzowalności dla materiałów NLO, kryteria doboru najlepszego algorytmu.

---

#### **Cele przedmiotu:**

Wprowadzenie podstawowych pojęć i metod nauki o materiałach, przegląd metod numerycznych stosowanych dla różnych skal modelowania.

### **Efekty kształcenia:**

Po ukończeniu kursu student powinien znać podstawowe metody stosowane w nauce o materiałach i umieć dobrać odpowiednią metodę numeryczną dla konkretnego etapu projektowania materiałów.

---

### **Zalecana literatura:**

1. D. Raabe Computational Materials Science, Wiley-VCH 1998. /li>