

# LuK-tutkielmatori: laskennallinen materiaalfysiikka

Delegointi ryhmän muille lehtoreille ja proffille.  
Myös kokeellisille.

- Yhteyshenkilö: lehtori Antti Kuronen ([antti.kuronen@helsinki.fi](mailto:antti.kuronen@helsinki.fi))
  - Tutkimusala laskennallinen materiaalfysiikka
  - Opetus: ohjelmointia, suurteholaskentaa, numeerisia menetelmiä, laskennallista nanotiedettä (+ Pintafyssa, SäFo)
- **Kandintutkielma laskennallisessa (materiaali)fysiikassa**
  - Fysiikan (tms.) ongelman ratkaisu laskennallisin menetelmin
    - Aihe oman kiinnostuksen mukaan
    - Käyttäen joko valmiita ohjelmistoja tai omaa koodia
    - Myös kirjallisuustyö mahdollinen
    - Säännölliset tapaamiset (2-4 vk välein)
  - Esimerkkejä aiheista (**vihreä=vapaa**, **punainen=tehty**):

**Materiaalin murtuminen ja sen mallinnus**

**Molecular dynamics simulation of cavitation**

**Materiaalin irroitus kavitaatioissa: mallinnus**

**Computational fluid mechanics**

**Yksiulotteinen ajasta riippuva Schrödingerin yhtälö**

**Atomiryppään rakenne simuloitulla jäähdytyksellä**

**Säteilyn (e, $\gamma$ ) eteneminen aineessa ja sen mallintaminen Monte Carlo -menetelmällä**

**Alfasäteily kvanttimekaniikassa ja sen Monte Carlo -simulaatiot ydinfysiikassa**

**GPU-laskentaa Kale-klusterissa**

**Describing human populations using methods of molecular dynamics simulation**