

Nabídka tématu na diplomovou práci

Stochastický transport částic v nehomogenních nano-kanálcích

anotace

Studium transportu částic v nehomogenních tenkých kanálcích je důležité pro vývoj nových aplikací (např. separátorů částic, senzorů atd.) a též pro pochopení adekvátních mikroskopických mechanismů. Struktura kanálků a transport jsou vzájemně spojené: struktura určuje transport a transport může měnit strukturu.

V práci se soustředíme na teoretické studium vlivu struktury kanálku na stacionární transport koloidních částic, které v něm proudí. Jako základní modelové schéma bude použito zobecnění tzv. asymetrického exklusivního procesu (ASEP), a to tak že uzly na lineárním řetízku budou nahrazeny buňkami celulárního automatu s proměnným objemem. Přitom tvar kanálku bude simulován polohově závislým proměnným objemem buněk.

Hlavním cílem bude zjistit, jak průměrná rychlost toku částic závisí na jejich hustotě (tzv. základní diagram). Prvním krokem bude reprodukce výsledků pro homogenní systém, kde všechny buňky mají stejný objem, který ovšem může být větší než jednotkový. Reprezentace pomocí celulárního automatu umožní získat nové výsledky pro nehomogenní systém. Budou se studovat různé geometrie kanálku, jeho zužování, rozšiřování, vychlípení do strany atd. Následně se bude analyzovat vliv velikosti proudících částic.

Zásady vypracování

Seznámení se s problematikou a vybranou literaturou.

Osvojení si potřebných simulačních metod.

Formulace nehomogenního kvazi-jednodimenzionálního celulárního automatu.

Výpočet stacionární toku částic pro různé hustoty částic a zvolenou nehomogenitu.

Získání a analýza výsledků pro různé nehomogenity.

Předpoklady: aktivní znalost programování, pasivní znalost angličtiny a chuť poznávat nové mechanismy transportu pomocí simulací.

literatura

[1] Nezbeda, I.; Kolafa, J.; Kotrla, M. Úvod do počítačových simulací. Praha : Karolinum 2002.

- [2] Liu Ming-Zhe, Li Shao-Da and Wang Rui-Li, Asymmetric simple exclusion processes with complex lattice geometries: A review of models and phenomena, Chinese Physics B, Volume 21, No. 9 (2012)
- [3] S. Wolfram, Statistical mechanics of cellular automata, Rev. Mod. Phys. 55, 601 (1983)
- [4] Newman, M.E.J.; Barkema, G.T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Oxford University Press 2002.
- [5] Další literatura doporučena vedoucím práce během jejího vypracování.