

KARTA KURSU (realizowanego w specjalności)

Fizyka materii

Studia II stopnia
2020/2021

Nazwa	Pracownia fizyki teoretycznej
Nazwa w j. ang.	<i>Laboratory of theoretical physics</i>

Koordynator	dr hab. R. Bujakiewicz-Korońska	Zespół dydaktyczny
		dr hab. T. Dobrowolski dr Dawid Naęcz
Punktacja ECTS*	2	

Opis kursu (cele kształcenia)

Zajęcia w ramach Pracowni Fizyki Teoretycznej poświęcone są numerycznym obliczeniom naukowym na bazie oryginalnych prac teoretycznych dotyczących fizyki ciała stałego.

Zajęcia będą odbywały się w pracowni komputerowej, a ich uczestnicy będą wykorzystywali oprogramowanie służące modelowaniu wykonaniu symulacji teoretycznych niezbędnych w ekologicznym projektowaniu materiałów i nanomateriałów nowej generacji. Modelowanie wykonane będzie z wykorzystaniem pakietu SIESTA.

Efekty uczenia się

	Efekt uczenia się dla kursu	Odniesienie do efektów dla specjalności (określonych w karcie programu studiów dla modułu specjalnościowego)
Wiedza	W01 Student posiada rozszerzoną wiedzę z zakresu fizyki teoretycznej	W01
	W02 Student zna zaawansowane obliczeniowe metody numeryczne stosowane w fizyce ciała stałego, w szczególności teorię funkcjonału gęstości oraz twierdzenia Hohenberga-Kohna	W02
	W03 Student zna najważniejsze osiągnięcia ostatnich dziesięcioleci w dziedzinie teorii fizyki ciała stałego	W05
	W04 Student zna naukową literaturę międzynarodową w zakresie teorii fizyki ciała stałego	W09

	Efekt uczenia się dla kursu	Odniesienie do efektów dla specjalności (określonych w karcie programu studiów dla modułu specjalność)
Umiejętności	U01 Student umie korzystać z programów do modelowania numerycznego w ramach teorii funkcjonału gęstości	U02
	U02 Student korzysta z czasopism naukowych publikujących wyniki badań z dziedziny teorii fizyki ciała stałego	U05
	U03 Student jest przygotowany do podjęcia współpracy z krajowymi i zagranicznymi centrami obliczeniowymi	U06

	Efekt uczenia się dla kursu	Odniesienie do efektów dla specjalności (określonych w karcie programu studiów dla modułu specjalnościowego)
Kompetencje społeczne	K01 Student jest dociekliwy w ustalaniu prawdy naukowej	K03
	K02 Student jest otwarty na systematyczną aktualizację wiedzy	K04
	K03 Student stawia sobie wysokie wymagania, aby móc wymagać od innych	K05

		Organizacja										
Forma zajęć	Wykład (W)	Ćwiczenia w grupach										
		A		K		L		S		P		E
Liczba godzin						15						

Opis metod prowadzenia zajęć

Pracownia Fizyki Teoretycznej ma na celu przygotowanie uczestników zajęć do prowadzenia samodzielnych obliczeń naukowych i modelowania komputerowego z zastosowaniem nowoczesnych metod obliczeniowych.

Zajęcia odbywają się w pracowni komputerowej, z wykorzystaniem zasobów zdalnych ACK Cyfronet (W ramach osobistych grantów obliczeniowych uczestników kursu)

Formy sprawdzania efektów kształcenia

	E – learning	Gry dydaktyczne	Ćwiczenia w szkole	Zajęcia terenowe	Praca laboratoryjna	Projekt indywidualny	Projekt grupowy	Udział w dyskusji	Referat	Praca pisemna (esej)	Egzamin ustny	Egzamin pisemny	Inne
W01					x	x	x						
W02					x	x	x						
W03					x	x	x						
W04					x	x	x						
U01					x	x	x						
U02					x	x	x						
U03					x	x	x						
K01					x	x	x						
K02					x	x	x						
K03					x	x	x						

Kryteria oceny	Na ocenę z przedmiotu składają się: <ul style="list-style-type: none">obecność na zajęciach,udział w zadaniach zespołowych,punktowane przygotowanie indywidualnego zadania obliczeniowego.
----------------	--

Uwagi	Możliwe przepisanie oceny z kursu o tej samej nazwie tylko pod warunkiem ekwiwalentnej liczby godzin i liczby punktów ECTS oraz co najmniej oceny dobrej.
-------	---

Treści merytoryczne (wykaz tematów)

1. Teoria funkcjonału gęstości (DFT, ang. *density functional theory*) jako filar metod kwantowo-mechanicznych, służących do modelowania struktury kryształów.
2. Podstawy Teorii DFT - Twierdzenia Hohenberga-Kohna.
3. Metoda Kohna-Shama jako praktyczną realizacją metody DFT.
4. Metodologia prowadzenia obliczeń na klastrach dużej mocy.
5. Struktura pasmowa oraz elektronowa gęstość stanów kryształów o wysokiej symetrii.

Wykaz literatury podstawowej

1. Lucjan Piela *Idee chemii kwantowej* Wydawnictwo Naukowe PWN Warszawa 2011
2. Charles Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego* Wydawnictwo Naukowe PWN Warszawa 2011
3. Podręcznik użytkownika PLGrid <https://docs.cyfronet.pl/pages/viewpage.action?pageId=4260592>

Wykaz literatury uzupełniającej

1. J. C. Slater G. F. Koster, Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem, Phys. Rev. 94 (1954) 1498.
2. J. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sanchez-Portal, The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation, J. Phys. Condens. Matter. 14 (2002) 2745.
3. T. Wolfram, R. Hurst, F. J. Morin, Cluster surface states for TiO₂, SrTiO₃, and BaTiO₃, Phys. Rev. B 15 (1977) 1151.

Bilans godzinowy zgodny z CNPS (Całkowity Nakład Pracy Studenta)

Ilość godzin w kontakcie z prowadzącymi	Wykład	
	Konwersatorium (ćwiczenia, laboratorium itd.)	15
	Pozostałe godziny kontaktu studenta z prowadzącym	5
Ilość godzin pracy studenta bez kontaktu z prowadzącymi	Lektura w ramach przygotowania do zajęć	15
	Przygotowanie krótkiej pracy pisemnej lub referatu po zapoznaniu się z niezbędną literaturą przedmiotu	
	Przygotowanie projektu lub prezentacji na podany temat (praca w grupie)	15
	Przygotowanie do egzaminu	
Ogółem bilans czasu pracy		50
Ilość punktów ECTS w zależności od przyjętego przelicznika 1 ECTS = 25 h		2