

KARTA KURSU (realizowanego w specjalności)

Fizyka materii

Studia II stopnia
2020/2021

Nazwa	Teoria funkcjonału gęstości w zastosowaniach
Nazwa w j. ang.	<i>Density functional theory in applications</i>

Koordynator	dr hab. R. Bujakiewicz-Korońska	Zespół dydaktyczny
		dr Dawid Nałęcz
Punktacja ECTS*	5	

Opis kursu (cele kształcenia)

Zajęcia w ramach laboratoriów z teorii funkcjonału gęstości w zastosowaniach poświęcone są numerycznym obliczeniom naukowym na bazie oryginalnych prac teoretycznych dotyczących fizyki ciała stałego. W trakcie zajęć silny nacisk położony zostanie na praktyczne zastosowanie wiedzy uzyskanej w trakcie wykładu oraz merytoryczną analizę otrzymanych wyników symulacji i sposobów ich wizualizacji. 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 specjalności)
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 oraz ma pogłębioną wiedzę w zakresie koniecznym do opisu zagadnień fizyki teoretycznej, modelowania procesów fizycznych jak również umożliwiającym opracowanie danych i prezentacji uzyskanych wyników	W02, W03
	W03 Student zna najważniejsze osiągnięcia ostatnich dziesięcioleci w dziedzinie teorii fizyki ciała stałego	W05
	W04 Student zna oprogramowanie użytkowe stosowane w badaniach z dziedziny fizyki ciała stałego a także wybrane pakiety oprogramowania stosowane do opracowania danych uzyskanych w pomiarach fizycznych i ich prezentacji	W07
	W05 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 specjalności)
Umiejętności	U01 Student umie korzystać z programów do modelowania numerycznego w ramach teorii funkcjonału gęstości	U01, U02, U03, U05, U06
	U02 Student korzysta z czasopism naukowych publikujących wyniki badań z dziedziny teorii fizyki ciała stałego	
	U03 Student potrafi w sposób twórczy rozwiązywać problemy obliczeniowe, potrafi kierować zespołem badawczym, oraz wykorzystuje różne źródła wiedzy do samodzielnego realizowania stawianych zadań	
	U04 Student potrafi wykorzystać techniki zdalnego wykonania obliczeń do podnoszenia swoich kwalifikacji zawodowych i osobistych	
	U05 Student potrafi przedstawić w formie ustnej i pisemnej własne osiągnięcia badawcze w zakresie nauk fizycznych w sposób zrozumiały dla szerokiego grona odbiorców	
	U06 Student jest przygotowany do podjęcia współpracy z krajowymi i zagranicznymi centrami obliczeniowymi	

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

Organizacja										
Forma zajęć	Wykład (W)	Ćwiczenia w grupach								
		A		K		L		S		P
Liczba godzin						60				

Opis metod prowadzenia zajęć

Laboratoria z teorii funkcjonału gęstości w zastosowaniach mają na celu przygotowanie uczestników kursu 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).

Uczestnik kursu uzyskane wyniki symulacji pakietami SIESTA, QE opracowuje graficznie, a następnie referuje w formie prezentacji dokonując ich interpretacji.

Formy sprawdzania efektów uczenia się

	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	X	X			X
W02					X	X		X	X	X			X
W03					X	X		X	X	X			X
W04					X	X		X	X	X			X
W05					X	X		X	X	X			X
U01					X	X		X	X	X			X
U02					X	X		X	X	X			X
U03					X	X		X	X	X			X
U04					X	X		X	X	X			X
U05					X	X		X	X	X			X
U06					X	X		X	X	X			X
K01					X	X		X	X				X
K02					X	X		X	X				X
K03					X	X		X	X				X

Kryteria oceny

Na ocenę z przedmiotu składają się:

- obecność na zajęciach,
- udział w zadaniach zespołowych,
- punktowane przygotowanie indywidualnego zadania obliczeniowego
- ocena prezentacji uzyskanych wyników

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. Wstęp do metodologii prowadzenia obliczeń na klastrach dużej mocy.
5. Struktura pasmowa oraz elektronowa gęstość stanów kryształów o wysokiej symetrii.
6. Metody wizualizacji uzyskiwanych wyników.
7. Metody optymalizacji procesu obliczeń dla układów niskosymetrycznych
8. Opracowanie danych obliczeniowych.
9. Prezentacja uzyskanych wyników

Wykaz literatury podstawowej

1. Lucjan Piel *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>

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. Ordejon, 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 TiO_2 , SrTiO_3 , and BaTiO_3 , *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.)	60
	Pozostałe godziny kontaktu studenta z prowadzącym	10
Ilość godzin pracy studenta bez kontaktu z prowadzącymi	Lektura w ramach przygotowania do zajęć	20
	Przygotowanie krótkiej pracy pisemnej lub referatu po zapoznaniu się z niezbędną literaturą przedmiotu	5
	Przygotowanie projektu lub prezentacji na podany temat (praca w grupie)	20
	Przygotowanie do egzaminu	10
Ogółem bilans czasu pracy		125
Ilość punktów ECTS w zależności od przyjętego przelicznika (1 ECTS = 25 h)		5