

KARTA KURSU (realizowanego w specjalności)

Fizyka materii

Studia II stopnia
2020/2021

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

Koordynator	Dr hab. R. Bujakiewicz-Korońska	Zespół dydaktyczny
		dr Dawid Nałęcz
Punktacja ECTS*	3	

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 teorię funkcjonału gęstości oraz twierdzenia Hohenberga-Kohna oraz ma pogłębioną wiedzę w zakresie koniecznym do opisu zagadnień fizyki teoretycznej, modelowania procesów fizycznych	W02,W03
	W03 Student zna najważniejsze osiągnięcia ostatnich dziesięcioleci w dziedzinie teorii fizyki ciała stałego	W05
	W04 Student podstawowe metody przybliżeń stosowane w symulacjach ab initio	W06
	W05 Student zna naukową literaturę międzynarodową w zakresie teorii fizyki ciała stałego	W07, W09

	Efekt uczenia się dla kursu	Odniesienie do efektów dla specjalności (określonych w karcie programu studiów dla specjalności)
Umiejętności	U01 Student umie zastosować teorię funkcjonału do modelowania numerycznego w ramach	U02, U06
	U02 Student korzysta z czasopism naukowych publikujących wyniki badań z dziedziny teorii fizyki ciała stałego	U05
	U03 Student potrafi w sposób twórczy rozwiązywać problemy teoretyczne i obliczeniowe, potrafi kierować zespołem badawczym, oraz wykorzystuje różne źródła wiedzy do samodzielnego realizowania stawianych zadań	U06
	U04 Student potrafi wykorzystać techniki zdalnego wykonania obliczeń do podnoszenia swoich Walifikacji zawodowych i osobistych	U04
	U05 Student potrafi przedstawić w formie ustnej i pisemnej własne osiągnięcia badawcze w zakresie nauk fizycznych w sposób zrozumiały dla szerokiego grona odbiorców	U01
	U06 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 specjalności)
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	30								

Opis metod prowadzenia zajęć

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
W02								X	X	X			X
W03								X	X	X			X
W04								X	X	X			X
W05								X	X	X			X
U01								X	X	X			X
U02								X	X	X			X
U03								X	X	X			X
U04								X	X	X			X
U05								X	X	X			X
U06								X	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 • 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. Pojęcie gęstości elektronowej
2. Twierdzenie Hohenberga-Kohna o równoważności funkcji falowej i gęstości elektronowej
3. Twierdzenie Hohenberga-Kohna o istnieniu funkcjonału energii z minimum dla ρ_0
4. Układ Kohna-Shama nie oddziałujących elektronów i wyrażenie na energię całkowitą
5. Wyprowadzenie równań Kohna-Shama
6. Wzór na energię korelacyjno-wymienną i jego interpretacja
7. Przybliżenia nielocalne (NLDA)
8. Potencjał i energia wymiennie-korelacyjna - fizyczna interpretacja
9. Funkcja rozkładu pary elektronów
10. Stopniowe włączenie oddziaływania elektronów
11. Dziury elektronowe
12. Dziura wymienna a dziura korelacyjna
13. Podstawy fizyczne poszczególnych przybliżeń (np. GGA, LCAO) w metodzie *ab initio*

Wykaz literatury podstawowej

1. Lucjan Piela *Idee chemii Wantowej* 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. 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 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	30
	Konwersatorium (ćwiczenia, laboratorium itd.)	
	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	10
	Przygotowanie projektu lub prezentacji na podany temat (praca w grupie)	15
	Przygotowanie do egzaminu	
Ogółem bilans czasu pracy		75
Ilość punktów ECTS w zależności od przyjętego przelicznika (1 ECTS=25h)		3