

WYDZIAŁ PODSTAWOWYCH PROBLEMÓW TECHNIKI	
KARTA PRZEDMIOTU	
Nazwa przedmiotu w języku polskim: Obliczenia numeryczne w nanoinżynierii	
Nazwa przedmiotu w języku angielskim: Numerical methods in nanoengineering	
Kierunek studiów (jeśli dotyczy): Fizyka Techniczna	
Specjalność (jeśli dotyczy): Nanoinżynieria	
Poziom i forma studiów:	II stopień, stacjonarna
Rodzaj przedmiotu:	wybieralny
Kod przedmiotu
Grupa kursów	TAK

	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	15		30		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	45		45		
Forma zaliczenia	Egzamin /zaliczenie na ocenę*		Egzamin /zaliczenie na ocenę*		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)	X				
Liczba punktów ECTS	3				
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			2		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego udziału nauczycieli lub innych osób prowadzących zajęcia (BU)	0.5		1.0		

*niepotrzebne skreślić

WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I KOMPETENCJI SPOŁECZNYCH

1. Umiejętności w zakresie programowania, obejmujące:
 - a) tworzenie i używanie własnych funkcji;
 - b) posługiwanie się własnymi typami danych np. rekordy, klasy;
 - c) usuwania i poprawy błędów w programie.
2. Znajomość fizyki ogólnej oraz podstaw z mechaniki kwantowej i fizyki ciała stałego.

CELE PRZEDMIOTU

- C1 Utrwalenie oraz rozszerzenie umiejętności programistycznych studenta.
- C2 Zaznajomienie studenta ze specyfiką obliczeń numerycznych.
- C3 Poznanie metod numerycznych.
- C4 Nabycie umiejętności stosowania metod numerycznych do rozwiązania konkretnych problemów fizycznych.

C5 Zwiększenie umiejętności w znajdowaniu i usuwaniu błędów oraz usterek w programie.

PRZEDMIOTOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Z zakresu wiedzy:

PEU_W01 Posługuje się swobodnie zaawansowanymi technikami programistycznymi – programowanie obiektowe.

PEU_W02 Zna bardziej zaawansowane algorytmy numeryczne.

PEU_W03 Umie znaleźć oraz wykorzystać różne biblioteki numeryczne ułatwiające rozwiązywanie wybranych zagadnień z fizyki.

Z zakresu umiejętności:

PEU_U01 Potrafi tworzyć całkiem złożony program używający obiektów.

PEU_U02 Potrafi zastosować wiedzę z metod numerycznych aby rozwiązać problemy z fizyki.

PEU_U03 Umie posługiwać się oraz wykorzystywać różne numeryczne biblioteki do wizualizacji danych oraz numerycznego rozwiązywania problemów.

PEU_U04 Umie samodzielnie zaimplementować algorytmy numeryczne.

Z zakresu kompetencji społecznych:

PEU_K01 rozumie potrzebę formułowania i przekazywania społeczeństwu (m.in. poprzez środki masowego przekazu) informacji i opinii dotyczących nanoinżynierii; potrafi przekazać takie informacje w sposób powszechnie zrozumiały.

TREŚCI PROGRAMOWE

Forma zajęć - wykład		Liczba godzin
Wy1	Wprowadzenie. Wady i zalety kompilowanych oraz interpretowanych języków programowania.	1
Wy2-3	Równanie Schroedingera. Rozwiązywanie zagadnienia własnego.	2
Wy4	Problem doboru poprawnych parametrów numerycznych.	1
Wy5-6	Heterostrukury i równanie masy efektywnej. Dyskretyzacja operatora energii kinetycznej.	2
Wy7-8	Równanie Poissona: dwuwymiarowy gaz swobodnych nośników oraz struktury polarne.	2
Wy9-10	Wielopasmowy model masy efektywnej.	2
Wy11-12	Stany metastabilne – wpływ pola elektrycznego w studniach kwantowych	2
Wy13-14	Ekscytony – metoda wariacyjna obliczania energii wiązania	2
Wy15	Metoda funkcji Greena	1
	Suma godzin	15

Forma zajęć - laboratorium	Liczba godzin
----------------------------	---------------

La1	Wprowadzenie. System operacyjny oraz środowisko programistyczne.	2
La2	Wprowadzenie do grafiki – wizualizacja danych.	2
La3	Implementacja algorytmu rozwiązywania równania Schroedingera.	2
La4	Porównanie rozwiązania numerycznego z analitycznych dla przypadków gdy równanie Schroedingera posiada analityczne rozwiązania.	
La5	Dobór odpowiednich parametrów numerycznych.	2
La6	Implementacja operatora BenDaniela-Duka oraz innych form operatora energii kinetycznej dla masy efektywnej zależnej od położenia.	2
La7	Obliczanie energii przejść w studniach kwantowych.	2
La8	Rozwiązywanie równania Poissona z 2D gęstością elektronową.	2
La9	Uwzględnienie naprężeń oraz efektów polaryzacyjnych w strukturach niskowymiarowych.	
La10	Oddziaływania pomiędzy dziurami: ciężkimi, lekkimi oraz spin-orbita – wielopasmowy model kp.	2
Lab11	Obliczanie czasu życia nośników dla studni kwantowej będącej w polu elektrycznym – stany metastabilne.	2
Lab12	Wariacyjne obliczanie energii ekscytonu w studni kwantowej.	2
Lab13	Rozwiązywanie równanie Poissona metodą funkcji Greena.	2
Lab14	Analiza wpływu pola elektrycznego na energię wiązania ekscytonu w studni kwantowej.	2
Lab15	Kolokwium zaliczeniowe.	2
	Suma godzin	30

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

- N1. Wprowadzenie do zajęć laboratoryjnych w formie tradycyjnej z wykorzystaniem prezentacji komputerowej.
N2. Omawianie przykładowych programów.
N3. Listy zadań. Praca samodzielna. Indywidualne/grupowe rozmowy na zajęciach.
N4. Konsultacje pozwalające na uzupełnienie treści programowych.

OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW UCZENIA SIĘ

Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu uczenia się	Sposób oceny osiągnięcia efektu uczenia się
F1 (wykład)	PEK_W01- PEK_W03- U03	Kolokwium zaliczeniowe.
F2 (ćwiczenia)	PEK_U01-U03, PEK_K01	Kolokwium. Dyskusje.
$P = F1 * 0.5 + F2 * 0.2$		

LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA

LITERATURA PODSTAWOWA:

- [1] Notatki do zajęć laboratoryjnych w formie elektronicznej udostępnione na stronie internetowej wykładowcy
- [2] T. Pang, *Metody obliczeniowe w fizyce. Fizyka i komputery*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2001
- [3] Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa
- [4] D. Potter, *Metody obliczeniowe fizyki*, PWN Warszawa.

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:

- [1] Materiały zamieszczone na stronie domowej opiekuna przedmiotu
- [2] Literatura dotycząca języka programowania użyta na zajęciach
- [3] Mark Lutz, *Programming Python*, wydawnictwo O'Reilly
- [4] Eli Bressert, *SciPy and NumPy*, wydawnictwo O'Reilly

OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIĘ, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)

Janusz Andrzejewski; Janusz.Andrzejewski@pwr.edu.pl