

WYDZIAŁ PPT / STUDIUM.....	
KARTA PRZEDMIOTU	
Nazwa w języku polskim:	Obliczenia 'ab initio'
Nazwa w języku angielskim:	'Ab initio' computational methods
Kierunek studiów (jeśli dotyczy):	Fizyka Techniczna
Specjalność (jeśli dotyczy):	Nanoinżynieria
Stopień studiów i forma:	II stopień, stacjonarna
Rodzaj przedmiotu:	obowiązkowy / wybieralny / ogólnouczelniany *
Kod przedmiotu	INP003006L
Grupa kursów	NIE

	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)			15		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)			30		
Forma zaliczenia	zaliczenie na ocenę		zaliczenie na ocenę		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS			1		
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			1		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)			1		

*niepotrzebne skreślić

WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1. Podstawowa wiedza z zakresu mechaniki kwantowej
2. Podstawowa wiedza z zakresy fizyki atomu cząsteczki i fazy skondensowanej
3. Umiejętność posługiwania się komputerem osobistym, w tym wskazana znajomość systemu LINUX
4. Kompetencje w zakresie pozyskiwania darmowych narzędzi komputerowych w Internecie
5. Kompetencje w zakresie docierania do uzupełniających obszarów wiedzy i umiejętności

CELE PRZEDMIOTU

- C1.** Nabycie podstawowej wiedzy teoretycznej w zakresie metod obliczeniowych *ab initio* w fizyce układów atomowych
- C2.** Nabycie praktycznej umiejętności zastosowanie metod *ab initio* do wyznaczania podstawowych charakterystyk fizycznych wybranych układów atomowych (cząsteczka,

kryształ, powierzchnia kryształu)

C3. Poszerzenie wiedzy z zakresu fizyki ciała stałego

C4. Doskonalenie umiejętności zwięzłego i klarownego ustnego sprawozdania z wykonanego projektu.

C5. Doskonalenie umiejętności pracy samodzielnej i współpracy w niewielkiej grupie.

C6. Doskonalenie umiejętności samodzielnego pozyskiwania literatury i korzystania z niej.

PRZEDMIOTOWE EFEKTY KSZTAŁCENIA

Z zakresu wiedzy:

PEK_W01 Posiada rozszerzoną wiedzę o teoretycznej w zakresie metod obliczeniowych *ab initio*

Z zakresu umiejętności:

PEK_U01 Umie zastosować obliczenia 'ab initio' do modelowania wybranych zagadnień fizycznych

Z zakresu kompetencji społecznych:

PEK_K01 Rozumie konieczność samokształcenia.

Forma zajęć - laboratorium		Liczba godzin
La1	Cząsteczka H ₂ , obliczenia jakościowe wielkości fizycznych (długość równowagowa, potencjał, częstość oscylacji, struktura elektronowa) bez analizy zbieżności	2
La2	Analiza zbieżności ze względu na parametry kontrolne; obliczenia ilościowe wielkości fizycznych cząsteczki H ₂ ; reprezentacje graficzne	1
La3	Krystaliczny krzem; wyznaczanie parametrów sieciowych i struktury elektronowej	4
La4	Kryształ i powierzchnia aluminium; wyznaczanie parametrów sieciowych kryształu i struktury jonowej powierzchni; energia powierzchniowa	4
La5	Wybrane zaawansowane techniki obliczeniowe (tensor elastyczny, dynamika sieci, tensor dielektryczny, ferromagnetyzm)	4
	Suma godzin	15

STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1. Praca z komputerem pod nadzorem prowadzącego laboratorium, w tym praca w małym 2-3 osobowym zespole

N2. Sprawozdania z ćwiczeń w formie prezentacji ustnych

N3. Konsultacje indywidualne z prowadzącym kurs

- N4. Praca własna, w tym praca własna z komputerem
 N5. Praca własna – studia literaturowe

OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW KSZTAŁCENIA

Oceny (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu kształcenia	Sposób oceny osiągnięcia efektu kształcenia
P	PEK_W01, PEK_U01, PEK_K01	Projekt

LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA

LITERATURA PODSTAWOWA:

- [1] Richard M. Martin, *Electronic structure, Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press (2004)

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:

- [1] <http://www.abinit.org/>
 [2] materiały dostarczone przez prowadzącego

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

Dr inż. Paweł Scharoch, pawel.scharoch@pwr.wroc.pl

MACIERZ POWIĄZANIA EFEKTÓW KSZTAŁCENIA DLA PRZEDMIOTU
Obliczenia 'ab initio'
 Z EFEKTAMI KSZTAŁCENIA NA KIERUNKU **Fizyka Techniczna**
 I SPECJALNOŚCI **Nanoinżynieria**

Przedmiotowy efekt kształcenia	Odniesienie przedmiotowego efektu do efektów kształcenia zdefiniowanych dla kierunku studiów i specjalności (o ile dotyczy)**	Cele przedmiotu* **	Treści programowe***	Numer narzędzia dydaktycznego** *
PEK_W01	K2FTE_W07_S1NIN	C1-C6	La1-La5	N1-N5
PEK_U01	K2FTE_U08	C1-C6	La1-La5	N1-N5
PEK_K01	K1FTE_K01	C1-C6	La1-La5	N1-N5

** - wpisać symbole kierunkowych/specjalnościowych efektów kształcenia

*** - z tabeli powyżej