

WYDZIAŁ PPT / STUDIUM.....	
<b>KARTA PRZEDMIOTU</b>	
<b>Nazwa w języku polskim:</b>	Zastosowania metod <i>ab initio</i>
<b>Nazwa w języku angielskim:</b>	<i>Ab initio methods</i>
<b>Kierunek studiów (jeśli dotyczy):</b>	Inżynieria Kwantowa
<b>Specjalność (jeśli dotyczy):</b>	
<b>Stopień studiów i forma:</b>	II stopień, stacjonarna
<b>Rodzaj przedmiotu:</b>	<b>obowiązkowy / wybieralny / ogólnouczelniany *</b>
<b>Kod przedmiotu</b>	.....
<b>Grupa kursów</b>	TAK

	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium
Liczba godzin zajęć zorganizowanych w Uczelni (ZZU)	<b>15</b>		<b>15</b>		
Liczba godzin całkowitego nakładu pracy studenta (CNPS)	<b>30</b>		<b>60</b>		
Forma zaliczenia	zaliczenie na ocenę		zaliczenie na ocenę		
Dla grupy kursów zaznaczyć kurs końcowy (X)					
Liczba punktów ECTS	<b>1</b>		<b>2</b>		
w tym liczba punktów odpowiadająca zajęciom o charakterze praktycznym (P)			<b>2</b>		
w tym liczba punktów ECTS odpowiadająca zajęciom wymagającym bezpośredniego kontaktu (BK)			<b>0,6</b>		

\*niepotrzebne skreślić

#### WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

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

#### CELE PRZEDMIOTU

- C1.** Nabycie podstawowej wiedzy teoretycznej w zakresie teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz obliczeń *ab initio*
- C2.** Nabycie praktycznej umiejętności zastosowanie metod *ab initio* do badania właściwości fizycznych układów atomowych
- 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:

W01 - ma pogłębioną i zaawansowaną wiedzę w zakresie teorii funkcjonału gęstości (DFT) będącej podstawą obliczeń z zasad pierwszych, w tym stosowanych w niej przybliżeń, ograniczeń, metod numerycznych w implementacji, oraz zastosowań w zakresie fizyki układów atomowych.

#### Z zakresu umiejętności:

U01 – potrafi wykonywać obliczenia ‘ab initio’ przy użyciu pakietu Abinit, podstawowych właściwości fizycznych układów atomowych, jak energia całkowita, gęstość elektronowa, optymalizacja struktury, energie formacji, wpływ czynników zewnętrznych, jak ciśnienie i naprężenia, na struktury elektronowe.

U02 – potrafi pracować w systemie operacyjnym LINUX; potrafi wykonywać obliczenia na komputerach dużej mocy, w specjalistycznym centrum obliczeniowym.

#### Z zakresu kompetencji społecznych:

K01 – potrafi realizować zadania w zespole; będąc samemu kreatywnym i twórczym potrafi uważnie i krytycznie analizować idee prezentowane przez innych członków zespołu, potrafi podejmować z innymi konstruktywne dyskusje prowadzące do uzgodnienia wspólnych działań.

Forma zajęć - Wykład		Liczba godzin
W1	Elektronowa struktura pasmowa z zasad pierwszych; wpływ odkształceń na strukturę elektronową; potencjały deformacyjne	2
W2	Elementy rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości 1: odpowiedź układu na wychylenia atomu	2
W3	Dynamika sieci z zasad pierwszych: metoda rachunku zaburzeń i różnic skończonych	2

<b>W4</b>	Elementy rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości 2: odpowiedź na odkształcenie kryształu	2
<b>W5</b>	Właściwości elastyczne z zasad pierwszych: metoda rachunku zaburzeń i różnic skończonych	2
<b>W6</b>	Elementy rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości 3: odpowiedź na pole elektryczne	2
<b>W7</b>	Właściwości dielektryczne z zasad pierwszych: metoda rachunku zaburzeń i różnic skończonych	3
	Suma godzin	<b>15</b>

<b>Forma zajęć – Laboratorium/Projekt</b>		<b>Liczba godzin</b>
<b>Temat 1</b>	Wyznaczanie struktury elektronowej wybranych układów oraz badanie wpływu ciśnienia i naprężeń na strukturę elektronową	15
<b>Temat 2</b>	Wyznaczanie związków dyspersyjnych fononów wybranego układu metodą różnic skończonych	15
<b>Temat 3</b>	Wyznaczanie związków dyspersyjnych fononów wybranego układu metodą rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości	15
<b>Temat 4</b>	Wyznaczanie tensora elastycznego wybranego układu metodą różnic skończonych	15
<b>Temat 5</b>	Wyznaczanie tensora elastycznego wybranego układu metodą rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości	15
<b>Temat 6</b>	Wyznaczanie tensora dielektrycznego wybranego układu metodą różnic skończonych	15
<b>Temat 7</b>	Wyznaczanie tensora dielektrycznego wybranego układu metodą rachunku zaburzeń funkcjonału gęstości	15
	Suma godzin	<b>15</b>

<b>STOSOWANE NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE</b>
<p><b>N1.</b> Studia literaturowe</p> <p><b>N2.</b> Praca z komputerem pod nadzorem prowadzącego laboratorium, w tym praca w małym 2-3 osobowym zespole</p> <p><b>N3.</b> Konsultacje indywidualne z prowadzącym kurs</p> <p><b>N4.</b> Praca własna, w tym praca własna z komputerem</p>

#### **OCENA OSIĄGNIĘCIA PRZEDMIOTOWYCH EFEKTÓW KSZTAŁCENIA**

<b>Oceny</b> (F – formująca (w trakcie semestru), P – podsumowująca (na koniec semestru))	Numer efektu kształcenia	Sposób oceny osiągnięcia efektu kształcenia
F1 – praca F2 – sprawozdanie P=0.2*F1+0.8*F2	W01,W03,W05 U01,U02,U06,U15 K01,K02,K05,K08	Sprawozdanie z projektu, prezentacja

<b>LITERATURA PODSTAWOWA I UZUPEŁNIAJĄCA</b>
<b><u>LITERATURA PODSTAWOWA:</u></b> [1] Richard M. Martin, <i>Electronic structure, Basic Theory and Practical Methods</i> , Cambridge University Press (2004)  <b><u>LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA:</u></b> [1] <a href="http://www.abinit.org/">http://www.abinit.org/</a> [2] materiały dostarczone przez prowadzącego
<b><u>OPIEKUN PRZEDMIOTU (IMIĘ, NAZWISKO, ADRES E-MAIL)</u></b> dr hab. inż. Paweł Scharoch, pawel.scharoch@pwr.edu.pl

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

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** *
W01	K2INK_W01, K2INK_W03, K2INK_W05	C1-C6	Projekt	N1-N5
U01, U02	K2INK_U01, K2INK_U02, K2INK_U06, K2INK_U15	C1-C6	Projekt	N1-N5
K01	K2INK_K01, K2INK_K02, K2INK_K05, K2INK_K08	C1-C6	Projekt	N1-N5

\*\* - wpisać symbole kierunkowych/specjalnościowych efektów kształcenia

\*\*\* - z tabeli powyżej