

WYDZIAŁ PPT / STUDIUM.....

KARTA PRZEDMIOTU**Nazwa w języku polskim:** *Obliczenia z zasad pierwszych oparte na teorii funkcjonału gęstości***Nazwa w języku angielskim:** *DFT- based 'Ab initio' calculations***Kierunek studiów (jeśli dotyczy):** *Inżynieria Kwantowa***Specjalność (jeśli dotyczy):****Stopień studiów i forma:** I stopień, stacjonarna**Rodzaj przedmiotu:** **obowiązkowy / wybieralny / ogólnouczelniany *****Kod przedmiotu** INP001007L**Grupa kursów** NIE

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

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 korzystania z zasobów internetowych
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 teoretycznych podstawach metod obliczeniowych *ab initio*

Z zakresu umiejętności:

PEK_U01 Umie zastosować metody obliczeniowe *ab initio* do modelowania wybranych zagadnień fizycznych

Z zakresu kompetencji społecznych:

PEK_K01 Rozumie konieczność samokształcenia.

PEK_K02 Potrafi współpracować w ramach zespołu badawczego

Forma zajęć - laboratorium	Liczba godzin	
La1-2	Cząsteczka H ₂ , obliczenia jakościowe wielkości fizycznych (długość równowagowa, potencjał, częstość oscylacji, struktura elektronowa) bez analizy zbieżności	4
La3	Analiza zbieżności ze względu na parametry	

	kontrolne; obliczenia ilościowe wielkości fizycznych cząsteczki H ₂ ; reprezentacje graficzne	2
La4-6	Krystaliczny krzem; wyznaczanie parametrów sieciowych oraz struktury elektronowej	6
La7-9	Kryształ i powierzchnia aluminium; wyznaczanie parametrów sieciowych kryształu i struktury jonowej powierzchni; energia powierzchniowa	6
La10-15	Wybrane zaawansowane techniki obliczeniowe (tensor elastyczny, dynamika sieci, tensor dielektryczny, ferromagnetyzm)	12
	Suma godzin	30

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
F1	PEK_W01, PEK01	Kolokwium pisemne
F2	PEK_U01,	Sprawozdania ustne z wykonywanych projektów
$P=0.4 \cdot F1 + 0.6 \cdot F2$		

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 (IMIE, 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 **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***
PEK_W01	K1INK_W07 <input type="text"/>	C1-C6	La1-La5	N1-N5
PEK_U01	K1INK_U03	C1-C6	La1-La5	N1-N5
PEK_K01, PEK_K02	K1INK_K03, K1INK_K07	C1-C6	La1-La5	N1-N5

** - wpisać symbole kierunkowych/specjalnościowych efektów kształcenia

*** - z tabeli powyżej