**Nazwa przedmiotu:**

Zastosowanie metod ab-initio do badania własności materiałów

**Koordynator przedmiotu:**

dr inz. Krzysztof Zberecki

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Fizyka Techniczna

**Grupa przedmiotów:**

Obieralne

**Kod przedmiotu:**

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2011/2012

**Liczba punktów ECTS:**

2

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład: | 30h |
| Ćwiczenia: | 0h |
| Laboratorium: | 0h |
| Projekt: | 0h |
| Lekcje komputerowe: | 0h |

**Wymagania wstępne:**

1. Fizyka kwantowa – rozwiązywanie stacjonarnego równania Schroedingera, atom wodoru
2. Wstęp do fizyki ciała stałego – wiązania w ciele stałym, sieć odwrotna, podstawy teorii pasmowej
3. Podstawy programowania

**Limit liczby studentów:**

**Cel przedmiotu:**

Głównym celem wykładu jest nabycie praktycznych umiejętności dotyczących obliczania struktury elektronowej ciał stałych, co jest jednym z głównych problemów fizyki ciała stałego. Uczestnictwo daje możliwość nabycia w krótkim czasie umiejętności wystarczających do przeprowadzania zaawansowanych obliczeń. Ukończenie zajęć oprócz nabytych umiejętności stanowi punkt wyjściowy do wykorzystania nowoczesnych metod obliczeniowych w innych dziedzinach w chemii kwantowej, fizyce materiałów i in.

**Treści kształcenia:**

1. Elementy mechaniki kwantowej układów wieloelektronowych.
2. Elementy teorii ciała stałego.
3. Przegląd podstawowych metod obliczania struktury pasmowej ciał stałych
4. Podstawy formalizmu funkcjonału gęstości (DFT).
5. Zastosowanie metod DFT do obliczania struktury pasmowej i innych własności ciał stałych.
6. Główna część wykładu – realizacja poznanych metod w formie nowoczesnych kodów numerycznych (ABINIT WIEN2k i inne).
7. Omówienie szeregu prac oryginalnych w których korzystano z przedstawionych na wykładzie metod oraz kodów.
8. Zajęcia praktyczne w pracowni komputerowej.

**Metody oceny:**

Obecność na wykładzie, zaliczenie laboratorium komputerowego

**Egzamin:**

**Literatura:**

A. Sukiennicki, R. Świrkowicz - „Teoria ciała stałego” OFPW, Warszawa
R. Martin „Electronic Structure – basic theory and practical methods” Cambridge 2004.

**Witryna www przedmiotu:**

**Uwagi:**

## Efekty przedmiotowe