



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Density functional approaches to the many-body problem, PG_00060061						
Kierunek studiów	Fizyka Techniczna						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2020 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2022/2023		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			angielski		
Semestr studiów	6	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Fizyki i Informatyki Stosowanej -> Zakład Metod Obliczeniowych Fizyki Chemicznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr Simone Taioli					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr Simone Taioli					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach		Praca własna studenta		RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30	0.0		0.0		30
Cel przedmiotu	Wykłady wprowadzają podejście funkcjonału gęstości do problemu wielu ciał i pokazują jego zastosowania w materii skondensowanej						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K6_U09] Potrafi korzystać z literatury specjalistycznej w języku angielskim.		Student potrafi znaleźć informacje dotyczące treści przedmiotu w zalecanych publikacjach napisanych w języku angielskim.		[SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu		
	[K6_W02] Posiada uporządkowaną wiedzę w zakresie podstaw fizyki, obejmującą mechanikę, termodynamikę, elektryczność i magnetyzm, optykę, fizykę atomu i cząsteczki, fizykę ciała stałego, fizykę jądra atomowego i cząstek elementarnych.		Student posiada uporządkowaną wiedzę z podstaw mechaniki kwantowej zależnej od czasu oraz zna jej zastosowania.		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		

Treści przedmiotu	<p>1. Podstawy mechaniki kwantowej Niezależne od czasu równanie Schrödingera i zasada wariacyjna Mechanika falowa nieoddziałujących fermionów Wektory bazowe i reprezentacje Okresowe warunki brzegowe Orbitale lokalne Model galarety Pseudopotencjały 2. Podstawy teorii funkcjonału gęstości Co to jest funkcjonał? Pochodne funkcjonalne Twierdzenia Hohenberga-Kohna Model Thomasa Fermiego Równania Kohna-Shama 3. Zasada wariacyjna w działaniu Twierdzenie Hellmanna-Feynmana Teoria zaburzeń z gęstością Funkcjonał Hohenberga-Kohna-Shama drugiego rzędu 4. Teoria odpowiedzi liniowej Funkcja odpowiedzi i jej związek z funkcjonałem gęstości Kohna-Shama Funkcja dielektryczna i teoria Ritchiego Odpowiedź liniowa i funkcje Greensa Odpowiedź liniowa w galarecie i w kryształach 5. Modelowanie atomów w ciałach stałych Spójna energia Stałe sprężyste Fonony i dynamika sieci Potencjały parami w cząsteczkach i ciałach stałych Wiążące podejście 6. Teoria funkcjonału gęstości zależnego od czasu (być może) Podstawowe twierdzenia Zależny od czasu schemat Kohna-Shama Obserwable zależne od czasu Odpowiedź liniowa i energie wzbudzenia 7. Metoda obliczeniowa (ćwiczenia) Minimum obliczeniowe Wiążące podejście do obliczeń struktur elektronicznych Obliczenia funkcjonału gęstości fali płaskiej Obliczenia funkcjonału gęstości z orbitali atomowych Obliczenia funkcjonału gęstości w przestrzeni rzeczywistej Obliczenia funkcjonału gęstości zależne od czasu (być może)</p>								
Wymagania wstępne i dodatkowe	<p>Podstawy mechaniki kwantowej</p> <p>Matematyka (całka, równanie różniczkowe)</p> <p>Podstawowa praktyczna znajomość programowania wysokiego poziomu (Fortran 90 i skrypt powłoki)</p>								
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1" data-bbox="448 804 1487 875"> <thead> <tr> <th data-bbox="448 804 794 842">Sposób oceniania (składowe)</th> <th data-bbox="794 804 1141 842">Próg zaliczeniowy</th> <th data-bbox="1141 804 1487 842">Składowa ocena końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="448 842 794 875">test</td> <td data-bbox="794 842 1141 875">50.0%</td> <td data-bbox="1141 842 1487 875">100.0%</td> </tr> </tbody> </table>			Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej	test	50.0%	100.0%
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej							
test	50.0%	100.0%							
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Notatki z wykładów zrobione podczas lekcji wystarczą, aby przetrwać egzamin.							
	Uzupełniająca lista lektur	<p>Dla głębszego poznania można przyjąć następujące teksty:</p> <p>Electronic structure: Basic Theory and Practical Methods by Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2nd edition, 2020, ISBN: 9781108555586</p> <p>Computational Nanoscience by Kálmán Varga & Joseph A. Driscoll, Cambridge University Press, 2012 ISBN: 9780511736230</p>							
	Adresy eZasobów	Uzupełniające Adresy na platformie eNauczanie:							
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Użyj kodu numerycznego opartego na DFT, aby obliczyć elektronową strukturę pasmową prostych brył, takich jak krzem, diament i grafit								
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy								