

SYLABUS PRZEDMIOTU – SZKOŁA DOKTORSKA
CYKL KSZTAŁCENIA OD 2019 DO 2023
CYKL KSZTAŁCENIA OD 2020 DO 2024

OGÓLNE INFORMACJE O PRZEDMIOCIE				
Tytuł przedmiotu		Wybrane zagadnienia metod obliczeniowych fizyki fazy skondensowanej		
Nazwa jednostki realizującej przedmiot		Szkoła Doktorska Uniwersytetu Rzeszowskiego		
Typ przedmiotu (<i>obowiązkowy, fakultatywny</i>)		Przedmiot obowiązkowy fakultatywny (specjalistyczny) do wyboru		
Rok/semestr		Rok – II i III; sem. letni 2021/2022		
Dyscyplina		Nauki fizyczne		
Język wykładowy		polski		
Imię i nazwisko koordynatora przedmiotu		Dr hab. Małgorzata Sznajder, prof. UR		
Imię i nazwisko osoby prowadzącej/osób prowadzących przedmiot		Dr hab. Małgorzata Sznajder, prof. UR		
Wymagania wstępne		Zaliczony kurs z podstaw fizyki fazy skondensowanej, w szczególności wiedza na temat kwantowo – mechanicznego opisu stanów elektronowych w kryształach, znajomość podstawowych przybliżeń w teorii pasmowej ciała stałego.		
STRESZCZENIE PRZEDMIOTU ORAZ CELÓW KURSU				
<p>Celem wykładu jest przybliżenie idei obliczeń kwantowo-mechanicznych prowadzonych w ramach teorii funkcjonału gęstości elektronowej, w sformułowaniu Kohna-Shama. Szczególny nacisk jest położony na przedstawienie podstaw teorii i rozwoju metod umożliwiających wyznaczenie struktury elektronowej ciała stałego. Omówienie przybliżeń stosowanych dla opisu oddziaływania wymiennego i korelacyjnego, ich ograniczeń. Przedstawienie praktycznych możliwości kodów numerycznych, z zaimplementowanym algorytmem rozwiązania równania Kohna-Shama w sposób samouczgodniony. Zapoznanie z różnymi typami funkcjonałów, omówienie ich zalet i wad. Przedstawienie sposobu doboru parametrów numerycznych dla wybranego kodu numerycznego (Siesta), testów tych parametrów, konstruowania i doboru wielkości superkomórek, sposobów relaksacji geometrii układu oraz obliczeń struktury pasmowej.</p>				
EFEKTY UCZENIA SIĘ DLA PRZEDMIOTU I METODY WERYFIKACJI				
Symbol efektu uczenia się	Zakładane efekty uczenia się	Odniesienie do efektów uczenia się dla kwalifikacji na poziomie 8 PRK (symbol)	Forma zajęć dydaktycznych (w., ćw., itp.)	Metody weryfikacji (np.: kolokwium, egzamin ustny, egzamin pisemny, projekt itp.)
Wiedza				
Lp.				
1.	Doktorant zna i rozumie światowy dorobek obejmujący podstawy teoretyczne teorii funkcjonału gęstości elektronowej układu wielu oddziałujących cząstek,	P8S-WG/1	w	raport
2.	zna i rozumie ideę Kohna – Shama zastąpienia układu oddziałujących cząstek pomocniczym układem niezależnych cząstek i sprowadzeniem efektów	P8S-WG/1	w	raport

	wielociałowych do postaci funkcyjna wymiennie – korelacyjnego,					
3	zna rozwój przybliżeń stosowanych do konstrukcji funkcyjna wymiennie – korelacyjnych, stosowanych w kwantowej teorii ciała stałego,	P8S-WG/2	w, ćw		Raport, projekt	
4	zna i rozumie metody samouzdognione rozwiązywania równania Kohna – Shama.	P8S-WG/2	w		dyskusja	
5	zna i rozumie metodologię badań w dyscyplinie nauki fizyczne	P8S-WG/3	w.		Dyskusja, projekt	
Umiejętności						
Lp.						
1	Doktorant potrafi wykorzystywać wiedzę z fizyki fazy skondensowanej oraz chemii kwantowej do rozwiązywania problemu wyznaczania energetycznej struktury elektronowej ciał krystalicznych, potrafi zdefiniować cel i przedmiot badań, sformułować hipotezę badawczą, twórczo stosować poznane techniki i narzędzia badawcze do osiągnięcia założonego celu,	P8S-UW/1	w, ćw		Raport, dyskusja, projekt	
2	Potrafi poddać krytycznej analizie i ocenie wyniki badań naukowych w dyscyplinie nauki fizyczne	P8S-UW/2	w, ćw		Raport, dyskusja, projekt	
3	potrafi zainicjować debatę i uczestniczyć w dyskursie naukowym dotyczącym wybranych metod obliczeniowych fizyki fazy skondensowanej	P8S-UK/3, P8S-UK/4; P8S-UK/1; P8S-UK/5	w, ćw		Raport, dyskusja, projekt	
Kompetencje społeczne						
Lp.						
1	Doktorant jest gotów do uznawania znaczenia zgromadzonej wiedzy w rozwiązywaniu praktycznych problemów fizyki fazy skondensowanej	P8S-KK/3	w		dyskusja	
2	Doktorant jest gotów do krytycznej oceny dorobku w ramach dyscypliny nauki fizyczne	P8S-KK/1	w		dyskusja	
3	Doktorant jest gotów do działania na rzecz interesu publicznego	P8S-KO/2	w		dyskusja	
FORMY ZAJĘĆ DYDAKTYCZNYCH, WYMIAR GODZIN I PUNKTÓW						
Semestr (nr)	Wykł.	Ćw./Konw.	Lab.	Prakt.	Inne	Liczba pkt. ECTS
VI	5	10				

METODY DYDAKTYCZNE

wykład - wykład z prezentacją multimedialną przy użyciu komputera i rzutnika, dyskusja
ćwiczenia laboratoryjne: praca z oprogramowaniem, rozwiązywanie zagadnienia problemowego

TREŚCI PROGRAMOWE

Wykład / Konwersatorium:

1. Podstawy teorii funkcjonału gęstości elektronowej. Przybliżenie Thomasa-Fermiego-Diraca, przykłady funkcjonałów. Twierdzenia Hohenberga – Kohna.
2. Pomocniczy układ Kohna – Shama. Równania wariacyjne Kohna – Shama. E_{xc} , V_{xc} , dziura wymiennie - korelacyjna. Znaczenie wartości własnych.
3. Funkcjonały dla oddziaływania wymiennego i korelacyjnego. Przybliżenia LDA, GGA. Funkcjonały hybrydowe. Testy funkcjonałów.
4. Rozwiązania równań Kohna – Shama.

Ćwiczenia / laboratoria / inne:

Generacja i optymalizacja pseudopotencjałów dla potrzeb obliczeń numerycznych w ramach teorii DFT przy pomocy oprogramowania Siesta. Dobór parametrów numerycznych. Relaksacja geometrii układu. Obliczenia struktury elektronowej układu.

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU (KRYTERIA OCENIANIA)

Warunkiem zaliczenia wykładu jest przedstawienie pisemnego raportu zawierającego omówienie najważniejszych wniosków z zagadnień poruszanych na wykładzie.

Warunkiem zaliczenia ćwiczeń jest uzyskanie ponad 51% punktów z projektu polegającego na przedstawieniu kompleksowych wyników obliczeń struktury pasmowej wybranego materiału krystalicznego, prowadzonych metodą *ab-initio* w ramach teorii funkcjonału gęstości Kohna-Shama. Projekt będzie obejmował wygenerowanie pseudopotencjałów, ich test, dobór parametrów numerycznych dla kodu Siesta, konstrukcję superkomórki adekwatnej do zadanego zagadnienia (np. kryształ zawierający defekty punktowe), relaksację geometrii układu, zdefiniowanie strefy Brillouina, wyznaczenie zależności $E(\mathbf{k})$ oraz funkcji gęstości stanów energetycznych.

Końcowa ocena będzie wystawiona w zależności od liczby punktów uzyskanych za projekt (ocenie podlega poprawność i kompletność poszczególnych elementów projektu):

dst (51 - 60)% pkt.,

+dst (61 - 70)% pkt.,

db (71 - 80)% pkt.,

+db (81 - 90)% pkt.,

bdb (91 - 100)% pkt.

CAŁKOWITY NAKŁAD PRACY DOKTORANTA POTRZEBNY DO OSIĄGNIĘCIA ZAŁOŻONYCH EFEKTÓW W GODZINACH ORAZ PUNKTACH ECTS

Forma aktywności	Średnia liczba godzin na zrealizowanie aktywności
Godziny realizowane w kontakcie bezpośrednim wynikające planu z studiów	15
Inne z udziałem nauczyciela (udział w konsultacjach, egzaminie)	1
Godziny realizowane samodzielnie przez doktoranta (przygotowanie do zajęć, egzaminu, napisanie referatu itp.)	20
SUMA GODZIN	36

SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS	
LITERATURA	
Literatura podstawowa:	<ol style="list-style-type: none"> 1. R. M. Martin, <i>Electronic structure. Basis Theory and Practical Methods</i>, Cambridge University Press, New York, 2009 2. Walter A. Harrison, <i>Solid State Theory</i>, Dover Publications, UK, 2012 3. Parr, R.G and Yang, W., <i>Density-Functional Theory of Atoms and Molecules</i>, Oxford University Press New York, 1989 4. Koch, W. and Holthausen, M.C., <i>A Chemists' Guide to Density Functional Theory</i>, Wiley-VCH, Weinheim, 2001
Literatura uzupełniająca:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Hohenberg, P. and Kohn, W. “<i>Inhomogeneous electron gas</i>”, <i>Phys. Rev.</i> 136:B864-871, 1964 2. Kohn W. and Sham, L.J. “<i>Self-consistent equations including exchange and correlation effects</i>”, <i>Phys. Rev.</i> 140:A1133-1138, 1965 3. Mermin, N.D. “<i>Thermal properties of the inhomogeneous electron gas</i>” <i>Phys. Rev.</i> 137:A 1441-1443, 1965 4. Kohn, W. “<i>Nobel lecture: electronic structure of matter wave functions and density functionals</i>” <i>Rev. Mod. Phys.</i> 71:1253, 1999 5. Jones, R.O. and Gunnarsson, O. “<i>The density functional formalism, its applications and prospect</i>”, <i>Rev. Mod. Phys.</i> 61:689-746, 1989 6. Casida, M.E. in <i>Recent Developments and Applications of Density Functional Theory</i>, ed. by J.M. Seminario, Elsevier, Amsterdam, 1996, p. 391 7. Staedele, M., Moukara, M., Majewski, J.A., Vogl, P., and Gorling, A., „<i>Exact exchange Kohn-Sham formalism applied to semiconductors</i>”, <i>Phys. Rev. B</i> 59:1001-10043, 1999

29.10.2021 Małgorzata Sznajder
 Data i podpis prowadzącego przedmiotu

.....
 Akceptacja Kierownika Jednostki lub osoby upoważnionej