

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu: Metody obliczeniowe fizyki i techniki 2

Rok akademicki: 2017/2018 Kod: JFT-1-709-s Punkty ECTS: 4

Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kierunek: Fizyka Techniczna Specjalność: —

Poziom studiów: Studia I stopnia Forma i tryb studiów: Stacjonarne

Język wykładowy: Polski Profil kształcenia: Ogólnoakademicki (A) Semestr: 7

Strona www: <http://galaxy.uci.agh.edu.pl/~bszafran>

Osoba odpowiedzialna: prof. dr hab. inż. Szafran Bartłomiej (bszafran@agh.edu.pl)

Osoby prowadzące: prof. dr hab. inż. Szafran Bartłomiej (bszafran@agh.edu.pl)

Krótką charakterystyka modułu

Przedmiot dotyczy rozwiązywania numerycznego równań mechaniki kwantowej oraz zastosowań metody Galerkin i pochodnych (metoda elementów skończonych) do rozwiązywania równań różniczkowych.

Opis efektów kształcenia dla modułu zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Powiązania z EKK	Sposób weryfikacji efektów kształcenia (forma zaliczeń)
Wiedza			
M_W001	Student zna metody różnicowe rozwiązywania zaleźnego od czasu równania Schroedingera	FT1A_W02, FT1A_W04, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W07, FT1A_W06, FT1A_W03	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Wykonanie projektu, Udział w dyskusji, Sprawozdanie, Projekt, Egzamin, Aktywność na zajęciach
M_W002	Student zna podstawy metody elementów skończonych	FT1A_W02, FT1A_W04, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W07, FT1A_W06, FT1A_W03	
M_W003	Student zna podstawy kwantowych metod wariacyjnych.	FT1A_W02, FT1A_W04, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W07, FT1A_W06, FT1A_W03	
M_W004	Student zna metody różnicowe rozwiązywania równania Schroedingera niezależnego od czasu	FT1A_W02, FT1A_W04, FT1A_W05, FT1A_W01, FT1A_W03	

Umiejętności			
M_U001	Student umie dokonać implementacji komputerowej wybranej metody różnicowej rozwiązywania równań Schroedingera zależnego i niezależnego od czasu. Student umie dokonać implementacji komputerowej metody wariacyjnej Rayleigha-Ritza dla problemu jednej cząstki.	FT1A_U11, FT1A_U06, FT1A_U04, FT1A_U05, FT1A_U03, FT1A_U01, FT1A_U02	Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Wykonanie projektu, Udział w dyskusji, Sprawozdanie, Projekt, Aktywność na zajęciach
Kompetencje społeczne			
M_K001	Student potrafi konstruktywnie współpracować w ramach zespołu w celu wspólnego opracowania programów do numerycznego rozwiązywania prostych problemów fizyki kwantowej i hydrodynamiki.	FT1A_K09, FT1A_K01	Wykonanie projektu, Udział w dyskusji, Aktywność na zajęciach

Matryca efektów kształcenia w odniesieniu do form zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Forma zajęć										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Inne	E-learning
Wiedza												
M_W001	Student zna metody różnicowe rozwiązywania zależnego od czasu równania Schroedingera	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W002	Student zna podstawy metody elementów skończonych	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W003	Student zna podstawy kwantowych metod wariacyjnych.	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W004	Student zna metody różnicowe rozwiązywania równania Schroedingera niezależnego od czasu	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Umiejętności												

M_U001	Student umie dokonać implementacji komputerowej wybranej metody różnicowej rozwiązywania równań Schroedingera zależnego i niezależnego od czasu. Student umie dokonać implementacji komputerowej metody wariacyjnej Rayleigha-Ritza dla problemu jednej cząstki.	-	-	+	+	-	-	-	-	-	-	-
Kompetencje społeczne												
M_K001	Student potrafi konstruktywnie współpracować w ramach zespołu w celu wspólnego opracowania programów do numerycznego rozwiązywania prostych problemów fizyki kwantowej i hydrodynamiki.	-	-	+	+	-	-	-	-	-	-	-

Treść modułu zajęć (program wykładów i pozostałych zajęć)

Wykład

1. Metody różnicowe rozwiązywania jednowymiarowych kwantowych problemów stacjonarnych dla stanów zlokalizowanych.
Metoda strzałów. Metoda czasu urojonego. Diagonalizacja Hamiltonianu różnicowego.
2. Metody rozwiązywania zależnego od czasu równania Schroedingera.
Dekompozycja stanu początkowego na stany własne. Metody różnicowe (Eulera, Cranka-Nicolson, Askara-Cakmaka). Pakiety falowe, twierdzenie Ehrenfesta. Analiza pakietu w przestrzeni pędów. Hamiltonian zależny od czasu. Przejścia wymuszone.
3. Metody dla problemów rozproszonych.
Metoda różnicowa. Macierz przejścia. Mody transportowe w układach wielowymiarowych. Przewodnictwo a prawdopodobieństwa przejścia (metoda Landauera). Rozwiązanie problemu rozproszonych w 2D.
4. Stany związane dla problemów wielowymiarowych. Radialne równanie Schroedingera.
4. Twierdzenie i metoda wariacyjna. Metoda Reyleigha-Ritza.
5. Metoda elementów skończonych dla równania Schroedingera
6. Rachunek zaburzeń. Atom helu. Metoda Hartree-Focka.
7. Metoda elementów skończonych dla problemów kwantomechanicznych.
8. Kwantowa dyfuzyjna wariacyjna metoda Monte Carlo
9. Metoda Galernika
10. Metoda elementów skończonych dla problemów stacjonarnych i zależnych od czasu

Ćwiczenia laboratoryjne

Studenci otrzymują do rozwiązania problemy na następujące tematy.

1. Metoda strzałów dla równania Schroedingera
2. Metoda czasu urojonego dla stanów własnych

3. Problemy zależne od czasu
 4. Problemy rozproszeniowe.
 5. Problemy stacjonarne rozwiązywane metodą Galerkiną
- W zestawach zadań podane są punkty milowe, które należy osiągnąć w czasie laboratorium. Ocena z ćwiczenia to średnia arytmetyczna z punktów, jakie student uzyskał w czasie ćwiczeń oraz oceny ze sprawozdania, zawierającego ilustrację uzyskanych wyników oraz ich krótki opis.

Ćwiczenia projektowe

Dwuosobowe zespoły rozwiązują problem na temat ustalony z prowadzącym. Tematy do wyboru:

- 1) Rozwiązanie metodą różnicową równania Schrödingera z potencjałem Yukawy.
- 2) Wyznaczanie współczynników transmisji i odbicia cząstki na potencjałach schodkowych metodą macierzy transferu.
- 3) Najprostsze wiązanie kowalencyjne. Zjonizowana cząsteczka wodoru.
- 4) Stany elektronowe w jednowymiarowej sieci krystalicznej.
- 5) Interferencja elektronu na dwóch ścieżkach.
- 6) Adiabatyczna ewolucja funkcji falowej w potencjale wolnozmiennym.

Sposób obliczania oceny końcowej

Ocena końcowa (OK) obliczana jest jako średnia ważona ocen z laboratorium (L), projektu (P) i egzaminu (E) wg. wzoru

$$OK = 0.45 L + 0.45 P + 0.1E.$$

Uzyskanie pozytywnej oceny końcowej (OK) wymaga uzyskania pozytywnej oceny z laboratorium (L), projektu (P) i egzaminu (E)

Egzamin jest ustny, zakres materiału obejmuje treść wykładu i metody użyte na zajęciach projektowych

Wymagania wstępne i dodatkowe

- Znajomość metod obliczeniowych fizyki i techniki I
- Znajomość podstaw matematycznych metod fizyki
- Znajomość podstaw mechaniki kwantowej

Zalecana literatura i pomoce naukowe

1. F.J. Vesely "Computational Physics, An Introduction" (Plenum Press, New York, 1994)
2. Tao Pang „Metody obliczeniowe w fizyce” (PWN, Warszawa, 2001)
3. S.E. Koonin, D. Meredith „Computational Physics” (Addison-Wesley, Reading, 1990)
4. R.H. Landau, M.J. Paez „Computational Physics: Problem Solving with Computers” (Wiley Interscience, New York, 1997)
5. Pavel Solin, Partial Differential Equations and the Finite Element Method, John Wiley & Sons Inc 2005.

Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu

1. Nanodevice for High Precision Readout of Electron Spin
By: Szumniak, P.; Bednarek, S.; Szafran, B.; et al.
Conference: 39th Conference on the Physics of Semiconductors Location: Jaszowied Int Sch, Krynica-Zdroj, POLAND Date: JUN 19-24, 2010
Sponsor(s): Inst Phys Polish Acad Sci; Univ Warsaw, Fac Phys; Inst High Pressure Phys Polish Acad Sci
ACTA PHYSICA POLONICA A Volume: 119 Issue: 5 Pages: 651-653 Published: MAY 2011
2. Spin accumulation and spin read out without magnetic field
By: Bednarek, S.; Szumniak, P.; Szafran, B.
PHYSICAL REVIEW B Volume: 82 Issue: 23 Article Number: 235319 Published: DEC 16 2010

3.
Selective suppression of Dresselhaus or Rashba spin-orbit coupling effects by the Zeeman interaction in quantum dots
By: Szafran, B.; Nowak, M. P.; Bednarek, S.; et al.
PHYSICAL REVIEW B Volume: 79 Issue: 23 Article Number: 235303 Published: JUN 2009
4.
Magnetic-Field Asymmetry of Electron Wave Packet Transmission in Bent Channels Capacitively Coupled to a Metal Gate
By: Kalina, R.; Szafran, B.; Bednarek, S.; et al.
PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 102 Issue: 6 Article Number: 066807 Published: FEB 13 2009
5.
Gated combo nanodevice for sequential operations on single electron spin
By: Bednarek, S.; Szafran, B.
NANOTECHNOLOGY Volume: 20 Issue: 6 Article Number: 065402 Published: FEB 11 2009
6.
Spin Rotations Induced by an Electron Running in Closed Trajectories in Gated Semiconductor Nanodevices
By: Bednarek, S.; Szafran, B.
PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 101 Issue: 21 Article Number: 216805 Published: NOV 21 2008
7.
Induced quantum dots and wires: Electron storage and delivery
By: Bednarek, S.; Szafran, B.; Dudek, R. J.; et al.
PHYSICAL REVIEW LETTERS Volume: 100 Issue: 12 Article Number: 126805 Published: MAR 28 2008
8.
Quantum dot defined in a two-dimensional electron gas at a n-AlGaAs/GaAs heterojunction: Simulation of electrostatic potential and charging properties
By: Bednarek, S.; Lis, K.; Szafran, B.
PHYSICAL REVIEW B Volume: 77 Issue: 11 Article Number: 115320 Published: MAR 2008
9.
Exciton spectra in vertical stacks of triple and quadruple quantum dots in an electric field
By: Szafran, B.; Barczyk, E.; Peeters, F. M.; et al.
PHYSICAL REVIEW B Volume: 77 Issue: 11 Article Number: 115441 Published: MAR 2008
10.
Electron correlations in charge coupled vertically stacked quantum rings
By: Szafran, B.; Bednarek, S.; Dudziak, M.
PHYSICAL REVIEW B Volume: 75 Issue: 23 Article Number: 235323 Published: JUN 2007

Informacje dodatkowe

Sposób i tryb wyrównania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach Laboratorium: Nieobecność wymaga od studenta samodzielnego opanowania przerabianego na tych zajęciach materiału.

Zasady zaliczania zajęć

Podstawowym terminem uzyskania zaliczenia jest koniec zajęć w danym semestrze.

Warunkiem przystąpienia do egzaminu jest wcześniejsze uzyskanie zaliczenia z ćwiczeń laboratoryjnych oraz projektu.

Egzamin przeprowadzany jest zgodnie z Regulaminem Studiów AGH § 16.

Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Przygotowanie do zajęć	20 godz
Przygotowanie sprawozdania, pracy pisemnej, prezentacji, itp.	20 godz
Udział w ćwiczeniach laboratoryjnych	15 godz
Udział w ćwiczeniach projektowych	10 godz
Wykonanie projektu	35 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	18 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	118 godz
Punkty ECTS za moduł	4 ECTS