

# Krakowska Interdyscyplinarna Szkoła Doktorska

## Opis przedmiotu/ course description

<b>Przedmiot/ Course :</b>	Wykład specjalistyczny z Oddziału Fizyki Materii Skondensowanej (NO3)  "Ab-initio methods in solid state physics"
<b>Moduł kształcenia/ Training module:</b>	Moduł specjalistyczny
<b>Okres realizacji/ Implementation period :</b>	II rok, semestr letni
<b>Język wykładowy/ Language:</b>	język angielski/ English
<b>Prowadzący/ Lecturer:</b>	dr hab. Przemysław Piekarz, dr hab. Paweł T. Jochym/Oddział Fizyki Materii Skondensowanej (NO3)
<b>Wymiar godzin przedmiotu/duration :</b>	30 godzin
<b>Forma prowadzenia zajęć/ Form of teaching :</b>	Wykłady 15 godzin, ćwiczenia 15 godzin
<b>Opis przedmiotu/ course content:</b>	<p>First-principles or ab-initio methods is a group of computational physics methods based on fundamental theories: quantum mechanics and statistical physics. The course will introduce theoretical foundation and applications of these methods in research of electronic, structural and dynamical properties of crystals and nanostructures.</p> <p>Topics:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Introduction - interactions in crystals</li><li>2. Self-consistent field approach - Hartree-Fock approximation</li><li>3. Density Functional Theory - LDA, GGA, Hybrid Potentials</li><li>4. Electronic structure - pseudopotentials, all-electron methods</li><li>5. Lattice dynamics - harmonic approximation</li><li>6. Lattice dynamics - anharmonicity</li><li>7. Perturbation methods - DFPT</li><li>8. Nanostructures modelling</li><li>9. Mechanical properties</li><li>10. Ab-initio molecular dynamics</li><li>11. Thermodynamics of crystal lattice</li><li>12. Overview of available implementations of ab-initio methods</li><li>13. Summary and discussion of course projects</li></ol>

	<p>Metody ab initio to przybliżone metody obliczeniowe bazujące na podstawowych teoriach fizyki: mechanice kwantowej i fizyce statystycznej. W trakcie wykładu omówione zostaną podstawy teoretyczne oraz przykłady zastosowania tych metod do badania własności elektronowych, strukturalnych i dynamicznych kryształów i układów nanostrukturalnych.</p>
<p><b>Efekty uczenia się wg SPRK zgodnie z Programem kształcenia KISD/ <i>learning outcomes at level 8 of the PRK according to the KISD Training Program:</i></b></p>	<p>EU1,EU2,EU3,EU8,EU13</p>
<p><b>Forma weryfikacji efektów uczenia się/ <i>Method of verification of learning outcomes:</i></b></p>	<p>oceny projektu lub testu zaliczeniowego</p> <p>Przygotowanie projektu dotyczącego metod obliczeniowych ab initio, wykorzystującego informacje przedstawione na wykładzie lub powiązanego bezpośrednio z tematem pracy doktorskiej/Preparing the project on ab initio calculation methods, using the information presented during lectures or directly connected with the PhD thesis.</p>
<p><b>Wymagania wobec uczestników/ <i>Requirements for participants:</i></b></p>	<p>Uczestnictwo w wykładach i ćwiczeniach. Zrozumienie metod ab initio w zakresie przedstawionym na wykładzie. Podstawowa wiedza z zakresu fizyki materii skondensowanej i mechaniki kwantowej/Participation in lectures and exercises. Understanding of the basis of the presented ab-initio methods and foundations of solid state physics and quantum mechanics.</p>