

# QUANTUM SYSTEMS SIMULATIONS - course description

| General information |                                                  |
|---------------------|--------------------------------------------------|
| Course name         | QUANTUM SYSTEMS SIMULATIONS                      |
| Course ID           | 11.3-WF-FizD-SyUKw-L-S14_genRCMBE                |
| Faculty             | <a href="#">Faculty of Physics and Astronomy</a> |
| Field of study      | Physics                                          |
| Education profile   | academic                                         |
| Level of studies    | Second-cycle studies leading to MS degree        |
| Beginning semester  | winter term 2021/2022                            |

| Course information        |                                                                              |
|---------------------------|------------------------------------------------------------------------------|
| Semester                  | 4                                                                            |
| ECTS credits to win       | 6                                                                            |
| Available in specialities | Computer Physics                                                             |
| Course type               | obligatory                                                                   |
| Teaching language         | polish                                                                       |
| Author of syllabus        | <ul style="list-style-type: none"><li>prof. dr hab. Mirosław Dudek</li></ul> |

| Classes forms  |                                |                            |                                |                            |                    |
|----------------|--------------------------------|----------------------------|--------------------------------|----------------------------|--------------------|
| The class form | Hours per semester (full-time) | Hours per week (full-time) | Hours per semester (part-time) | Hours per week (part-time) | Form of assignment |
| Lecture        | 30                             | 2                          | -                              | -                          | Exam               |
| Laboratory     | 30                             | 2                          | -                              | -                          | Credit with grade  |

## Aim of the course

Studenci powinni poznać metody numeryczne symulacji układów kwantowych. Dotyczy to wybranych zagadnień mechaniki kwantowej i informatyki kwantowej.

## Prerequisites

Znajomość mechaniki kwantowej, znajomość metod matematycznych fizyki, znajomość języków programowania - wiedza i umiejętności spełniające kryteria K2A\_W01.

## Scope

1. Mechanika kwantowa:

- paczki falowe (gaussowska paczka falowa, dyfrakcja, tunelowanie),
- symulacje z użyciem metod chemii kwantowej (orbitale, wyznacznik Slatera, równania Hartree-Focka, metoda DFT),
- symulacje metodą kwantowego Monte Carlo,

2. Wybrane zagadnienia informatyki kwantowej (pojęcie qubit, działania na qubitach, algorytmy kwantowe).

## Teaching methods

Metody kształcenia mają formę wykładu, laboratorium komputerowego i ćwiczeń rachunkowych. Na wykładzie przedstawiona zostaje teoria. Wykład wzbogacony jest prezentacjami przykładowych wyników symulacji komputerowych i wskazaniem jak i kiedy stosować metody kwantowe. Laboratorium ma charakter praktyczny, gdzie studenci omawiają materiał z wykładu, przygotowują symulacje prostych układów kwantowych, zapoznają się z dostępnymi bibliotekami do prowadzenia symulacji układów kwantowych. Sugerowany język programowania – Python.

## Learning outcomes and methods of their verification

| Outcome description                                                                              | Outcome symbols                                                        | Methods of verification                                                                                                         | The class form                                                             |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|
| Studenci posiadają podstawową wiedzę dotyczącą metod symulacji komputerowych układów kwantowych. | <ul style="list-style-type: none"><li><a href="#">K2_W01</a></li></ul> | <ul style="list-style-type: none"><li>a discussion</li><li>a quiz</li><li>an exam - oral, descriptive, test and other</li></ul> | <ul style="list-style-type: none"><li>Lecture</li><li>Laboratory</li></ul> |

| Outcome description                                                                                                                                                                                                                                          | Outcome symbols                                                                                              | Methods of verification                                                                                                                   | The class form                                                                    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|
| Wiedza ogólna wsparta jest szczegółową umiejętnością zaimplementowania prostych modeli kwantowych w symulacji komputerowej. Potrafią wytłumaczyć opisy przebiegu zjawisk i uzasadnić stosowane metody. Posiadają elementarną wiedzę z informatyki kwantowej. | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <a href="#">K2_W01</a></li> <li>• <a href="#">K2_W04</a></li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• a discussion</li> <li>• a quiz</li> <li>• an exam - oral, descriptive, test and other</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Lecture</li> <li>• Laboratory</li> </ul> |

## Assignment conditions

Wykład kończy się egzaminem na ocenę. Forma zaliczenia to sprawdzenie pisemne wiedzy teoretycznej i umiejętności praktycznych. Na ćwiczeniach efekty kształcenia weryfikowane są ocenami częściowymi dotyczącymi wykonanych zadań, ocenami ze sprawdzianów pisemnych i oceną końcową z umiejętności wykonania symulacji komputerowej dla określonego zagadnienia kwantowego.

Przed przystąpieniem do egzaminu student musi uzyskać zaliczenie z ćwiczeń.

**Ocena ogólna:** średnia arytmetyczna ocena z egzaminu i zaliczenia.

## Recommended reading

[1] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, G. Rajagopal, Reviews of Modern Physics, Vol. 73, No. 1, January 2001

[2] Leonard I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw Hill Book Company (1968).

## Further reading

[1] Internet, biblioteki Pytona.

## Notes

Modified by dr Marcin Kośmider (last modification: 09-05-2021 21:32)

Generated automatically from SylabUZ computer system