

Symulacje układów kwantowych - opis przedmiotu

Informacje ogólne	
Nazwa przedmiotu	Symulacje układów kwantowych
Kod przedmiotu	11.3-WF-FizD-SyUKw-L-S14_genRCMBE
Wydział	Wydział Fizyki i Astronomii
Kierunek	Fizyka / Fizyka komputerowa
Profil	ogólnoakademicki
Rodzaj studiów	drugiego stopnia z tyt. magistra
Semestr rozpoczęcia	semestr zimowy 2016/2017

Informacje o przedmiocie	
Semestr	4
Liczba punktów ECTS do zdobycia	6
Typ przedmiotu	obowiązkowy
Język nauczania	polski
Sylabus opracował	prof. dr hab. Mirosław Dudek

Formy zajęć					
Forma zajęć	Liczba godzin w semestrze (stacjonarne)	Liczba godzin w tygodniu (stacjonarne)	Liczba godzin w semestrze (niestacjonarne)	Liczba godzin w tygodniu (niestacjonarne)	Forma zaliczenia
Wykład	30	2	-	-	Egzamin
Laboratorium	30	2	-	-	Zaliczenie na ocenę

Cel przedmiotu

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

Wymagania wstępne

Znajomość mechaniki kwantowej, znajomość metod matematycznych fizyki, znajomość języków programowania - wiedza i umiejętności spełniające kryteria K2A_W01.

Zakres tematyczny

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

Metody kształcenia

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.

Efekty uczenia się i metody weryfikacji osiągania efektów uczenia się

Opis efektu	Symbole efektów	Metody weryfikacji	Forma zajęć
Studenci posiadają podstawową wiedzę dotyczącą metod symulacji komputerowych układów kwantowych.	K2_W01	- dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - sprawdzian	- Wykład - Laboratorium
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.	K2_W01 K2_W04	- dyskusja - egzamin - ustny, opisowy, testowy i inne - sprawdzian	- Wykład - Laboratorium

Warunki zaliczenia

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.

Literatura podstawowa

[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).

Literatura uzupełniająca

[1] Internet, biblioteki Pytona.

Uwagi

Zmodyfikowane przez prof. dr hab. Mirosław Dudek (ostatnia modyfikacja: 30-09-2016 20:42)

Wygenerowano automatycznie z systemu SyllabUZ