

NAZIV PREDMETA		Numeričko modeliranje elektronske strukture				
Kod	PMP402	Godina studija				
Nositelj/i predmeta	izv. prof.dr. sc. Željana Bonačić Lošić	Bodovna vrijednost (ECTS)	5,0			
Suradnici	izv. prof.dr. sc. Željana Bonačić Lošić	Način izvođenja nastave (broj sati u semestru)	P	S	V	T
			30		15	
Status predmeta		Postotak primjene e-učenja	20%			
OPIS PREDMETA						
Ciljevi predmeta	Upoznavanje s teorijskim i numeričkim metodama za određivanje elektronske strukture i transporta na nanoskali.					
Uvjeti za upis predmeta i ulazne kompetencije potrebne za predmet	Poznavanje: kvantne mehanike, osnova fizike čvrstog stanja, osnova numeričkog programiranja.					
Očekivani ishodi učenja na razini predmeta (4-10 ishoda učenja)	Savladavanja gradiva trebalo bi omogućiti: 1. razumijevanje problema interagirajućih elektrona 2. shvaćanje teorije funkcionala gustoće kao teorije koreliranih sistema, 3. razumijevanje valjanosti aproksimacija na funkcionalne u ovisnosti o sistemu čestica 4. odabir pseudopotencijala i korištenje njihove transferabilnosti 5. korištenje numeričkih paketa pri izračunu elektronske strukture sistema 6. određivanje svojstava atoma, molekula i čvrstih tvari					
Sadržaj predmeta detaljno razrađen prema satnici nastave	1. Uvod u više-čestični problem interagirajućih elektrona (Hartree-Fockova aproksimacija, energija zamjene i korelacije), 5 sati 2. Matrica gustoće, 2 sata 3. Thomas-Fermi-Dirac aproksimacija, pr. funkcionala, 2 sata 4. Teorija funkcionala gustoće (DFT): Hohenberg-Kohn teoremi, 4 sati 5. Kohn-Sham ansatz i jednačbe, 6 sati 6. Funkcionalni za zamjenu i korelacije u: aproksimacija lokalne gustoće (LDA), aproksimaciji generaliziranog gradijenta (GGA), orbitalno ovisnih funkcionala, hibridnih funkcionala, 5 sata 7. Pseudopotencijali, 5 sati 8. Metode određivanja elektronske strukture atoma, molekula i kondenzirane tvari, 6 sati 9. Upoznavanje sa odabranim numeričkim komputerskim paketima. 10 sati					
Vrste izvođenja nastave:	<input checked="" type="checkbox"/> predavanja <input type="checkbox"/> seminari i radionice <input checked="" type="checkbox"/> vježbe <input type="checkbox"/> on line u cijelosti <input type="checkbox"/> mješovito e-učenje <input type="checkbox"/> terenska nastava		<input type="checkbox"/> samostalni zadaci <input type="checkbox"/> multimedija <input type="checkbox"/> laboratorij <input type="checkbox"/> mentorski rad <input type="checkbox"/> domaće zadaće			
Obveze studenata	Pohađanje nastave i aktivno sudjelovanje na vježbama. Predana izvješća o izvršenim vježbama.					

Praćenje rada studenata ( <i>upisati udio u ECTS bodovima za svaku aktivnost tako da ukupni broj ECTS bodova odgovara bodovnoj vrijednosti predmeta</i> ):	Naziv	Ects	Naziv	Ects	Naziv	Ects
	Pohađanje nastave	1	Istraživanje		Ekperimentalni rad	
	Usmeni ispit	2	Referat		Domaće zadaće	
	Seminarski rad		Esej			
	Kolokvij	1	Praktični rad	1		
	Pismeni ispit		Projekt			
Ocjenjivanje i vrjednovanje rada studenata tijekom nastave i na završnom ispitu	Predana izvješća o izvršenim vježbama. Usmeni ispit.					
Obvezna literatura (dostupna u knjižnici i putem ostalih medija)	<b>Naslov</b>		<b>Broj primjeraka u knjižnici</b>	<b>Dostupnost putem ostalih medija</b>		
	[1] Richard M. Martin: "Electronic Structure", Cambridge University Press, 2004.		0			
	[2] Prezentacije s predavanja, web		0			
Dopunska literatura	[1] Robert G. Paar and WeitaoYang: Density-functional theory of atoms and molecules, Oxford University Press 1989. [2] J. Kohanoff: "Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules", Cambridge University Press, 2006.					
Načini praćenja kvalitete koji osiguravaju stjecanje utvrđenih ishoda učenja	Sudjelovanje i motiviranost pri izradi vježbi. Rezultati ispita. Studentska evaluacija. Institucijska i vaninstitucijska provjera. Statistika ispitnih rezultata i studentsko evaluiranje putem anonimne ankete na kraju izvedbe predmeta. Anketa se provodi prema pravilniku Sveučilišta u Splitu.					
Ostalo (prema mišljenju predlagatelja)						