

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea de Vest din Timișoara
1.2 Facultatea / Departamentul	FIZICA
1.3 Departamentul	FIZICA
1.4 Domeniul de studii	FIZICA
1.5 Ciclul de studii	LICENTA
1.6 Programul de studii / Calificarea	FIZICA INFORMATICA / fizician (211101); profesor în învățământul gimnazial (232201 - în condițiile legii); asistent de cercetare (248102); referent de specialitate în învățământ (235204); analist (213101)

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	METODE COMPUTATIONALE IN MECANICA CUANTICA						
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. dr. Marius Paulescu						
2.3 Titularul activităților de seminar	Prof. dr. Marius Paulescu						
2.4 Anul de studiu	3	2.5 Semestrul	6	2.6 Tipul de evaluare	E	2.7 Regimul disciplinei	Ob

### 3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					14
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate / pe teren					14
Pregătire seminare / laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					-
Examinări					3
Alte activități					14
3.7 Total ore studiu individual	<b>59</b>				
3.8 Total ore pe semestru	<b>115</b>				
3.9 Numărul de credite	<b>5</b>				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Matematica, Mecanica Cuantica, Metode numerice si simulare in fizica
4.2 de competențe	•

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	•
5.2 de desfășurare a seminarului / laboratorului	• Computer pentru fiecare student

## 6. Obiectivele disciplinei - rezultate așteptate ale învățării la formarea cărora contribuie parcurgerea și promovarea disciplinei

Cunoștințe	Insusirea de catre student a metodelor computationale de modelare a fenomenelor din mecanica cuantica si aplicarea lor la rezolvarea a problemelor din subdomeniul electronica cuantica
Abilități	Dezvoltarea capacitatii studentului de analiza si sinteza a modelelor din unele capitole ale mecanicii cuantice si de a dezvolta algoritmi numerici de rezolvare a problemelor asociate Dezvoltarea capacitatii studentului de programare a computerelor
Responsabilitate și autonomie	Utilizarea eficientă a surselor informaționale și a resurselor de comunicare și formare profesională asistată, atât în limba română, cât și într-o limbă de circulație internațională

## 7. Conținuturi

7.1 Curs	Metode de predare	Observații
1. Ecuația Schrodinger.	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
2. Soluții numerice ale ecuației Schrodinger independenta de timp. Scheme cu diferente finite.	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
3 Metoda tirului	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
4. Metoda tirului. Aplicații	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
5. Pachetul Gaussian. Algoritmul Krank-Nicolson	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
6. Oscilatorul armonic. Metode computationale de studiu	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
7. Mișcarea libera pe porțiuni. Matrici de transfer	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
8. Matrici de transfer. Gropi de potential cuplate	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
9. Matrici de transfer. Potentiale periodice	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
10. Electronii într-un potential periodic	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
11. Probleme cu masa particulei dependenta de pozitie	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
12. Ecuația Schrodinger in cazul potentialelor centrale	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
13. Studiul imprastierii pe un potential central folosind metode numerice	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar
14. Utilizarea metodelor computationale la studiul sistemelor nanostructurate	Prelegere participativa	[1] Notite de curs si seminar

**Bibliografie**

1. M. Paulescu, E. Paulescu, Metode Computationale in Mecanica Cuantica. Notite de curs. Disponibile pe e-learning.
1. Ion I Cotaescu Mecanica Cuantica, Tipografia UVT, 1990, Timisoara
2. A Messiaah Mecanica Cuantica, Ed. Stiintifica, 1973, Bucuresti
3. B Demsoreanu Metode Numerice cu Aplicatii in Fizica, Ed Academiei Romane 2005 Bucuresti
4. Supriyo Datta (2007) Quantum transport - Atom to transistor, Cmbridge University Press.
5. JM Martinez Duart, RJ Martin-Palma, F Agullo-Rueda (2006) Nanotechnology for Microelectronics and Optoelectronics, Elsevier, Amsterdam
6. C T Sah Fundamentals of Solid-States Electronics World Scientific Publishing, 1991.
7. J. Epperson, An introduction to numerica methods and analysis, Wiley Interscience, 2007
8. W Gibs, Computational in modern physics, World Scientific, Singapore, 2006.

<b>7.2 Seminar</b>	<b>Metode de predare</b>	<b>Observații</b>
1. Probleme simple unidimensionale	Indrumare. Problematizare.	[1] Notite de curs si seminar
2. Solutii numerice ale ecuatiei Schrodinger independenta de timp. Scheme cu diferente finite.	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
3. Mediul de programare MathCAD. Recapitulare. Studiul gropii infinite de potential folosind diferente finite	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
4. Studiul altor probleme remarcabile prin metoda tirului	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
5. Studiul numeric al pachetului Gaussian. Implementarea algoritmului Krank-Nicolson	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
6. Oscilatorul armonic. Studiul prin metode numerice, Implementarea algoritmilor	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
7. Metoda matricilor de transfer. Implementarea in MathCAD	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
8. Studiul sistemelor cuantice cuplate prin metoda matricilor de transfer	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
9. Studiul superretelei prin metoda matricilor de transfer	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
10. Relatia lui Kramers	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
11. Calculul numeric al transmitantei in cazul sistemelor cu masa dependenta de pozitie	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar

12. Imprastierea pe un potential central. Rezolvare de probleme	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
13. Imprastierea pe un potential central. Implementarea unei metode numerice	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
14. Aplicarea metodei diferentelor finite la studiul sistemelor nanostructurate	Indrumare. Problematizare. Implementarea individuala a algoritmilor	[1] Notite de curs si seminar
<b>Bibliografie</b>		
2. M. Paulescu, E.Paulescu, Metode Computationale in Mecanica Cuantica. Notite de curs. Disponibile pe e-learning.		

### 8. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunității epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului

Continutul cursului este focalizat pe aplicarea metodelor numerice la rezolvarea problemelor din nanoelectronica, unul dintre domeniile in plina expansiune in dezvoltarea aparaturii electronice actuale.

### 9. Evaluare

Tip activitate	9.1 Criterii de evaluare	9.2 Metode de evaluare	9.3 Pondere din nota finală
9.4 Curs	Cunostinte de baza	Test scris intrebari /rezolvarea unei probleme	50%
9.5 Seminar / laborator	Dezvoltarea aplicatiilor numerice pentru rezolvarea unor probleme de mecanica cuantica si implementare	Evaluare continua la seminar / rezolvarea corecta a problemelor propuse la seminar	20%
		Proiect. Evaluare pe parcurs/ Rezolvarea numerica a unei probleme pe o tema data	30%
9.6 Standard minim de performanță			
Studentul obtine jumatate din punctajul la evaluarea pe parcurs si dezvolta un proiect			

Data completării  
20.01.2023

Titular de disciplină  
Prof. Dr. Marius Paulescu



Data avizării în departament

Director de departament