

Metode computationale in mecanica cuantica

Curs
1. Ecuatia Schrodinger.
2. Soluții numerice ale ecuației Schrodinger independenta de timp. Scheme cu diferențe finite.
3 Metoda tirului
4. Metoda tirului. Aplicații
5. Pachetul Gaussian. Algoritmul Krank-Nicolson
6. Oscilatorul armonic. Metode numerice de studiu
7. Mișcarea liberă pe porțiuni. Matrici de transfer
8. Matrici de transfer. Grupuri de potențial cuplate
9. Matrici de transfer. Potentiale periodice
10. Electronii într-un potențial periodic
11. Probleme cu masa particulei dependentă de poziție
12. Ecuatia Schrodinger în cazul potențialelor centrale
13. Studiul împrăștierei pe un potențial central folosind metode numerice (partea I)
14. Studiul împrăștierei pe un potențial central folosind metode numerice (partea II)

Seminar
1. Probleme simple unidimensionale
2. Soluții numerice ale ecuației Schrodinger independentă de timp. Scheme cu diferențe finite.
3. Mediul de programare MathCAD. Recapitulare. Studiul grupurilor infinite de potențial folosind diferențe finite
5. Studiul numeric al pachetului Gaussian. Implementarea algoritmului Krank-Nicolson
6. Oscilatorul armonic. Studiul prin metode numerice, Implementarea algoritmilor
7. Metoda matricilor de transfer. Implementarea în MathCAD
8. Studiul sistemelor cuantice cuplate prin metoda matricilor de transfer
9. Studiul superrețelei prin metoda matricilor de transfer
10. Relația lui Kramers
11. Problema cu masa dependentă de poziție
12. Împrăștierea pe un potențial central. Rezolvare de probleme
13. Împrăștierea pe un potențial central. Metoda tirului
14. Împrăștierea pe un potențial central. Matrici de transfer

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 Aplicații 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.