Lista pytań na zaliczenie kolokwium czwartkowego 2012-2013

**11.10.2012 prof. Andreas Savin, Open questions in DFT**

1. Co to znaczy, że teoria jest konsystentna rozmiarowo?

2. Dlaczego w obliczeniach kwantowo chemicznych stosuje się DFT pomimo ich wad?

Ad. 1

do nieskończoności, to energia całego układu przewidziana przez teorię

konsystentną rozmiarowo jest sumą energii podukładów.

Ad. 2

małym koszcie numerycznym (N^3).

Tzn. jeżeli rozpatrywany układ podzielimy na dwa podukłady i rozsuniemy je

DFT daje stosunkowo dobre wyniki (uwzględniające efekty korelacyjne) przy

**4.10.2012 prof. dr hab. Ewa Górecka, Liquid crystalline nanoparticles**

1. Co to są ciekłe kryształy?
2. Typy ciekłych kryształów.

**18.10.2012 dr Marzena Anna Lewandowska, Z laboratorium do łóżka pacjenta:**

**molekularne podstawy do personalizacji chemioterapii**

1. Mutacja genu, a ekspresja genu. Wyjaśnij krótko oba pojęcia - opracowuje Natalia Kijek

Gen jest fragmentem DNA (kwasu deoksyrybonukleinowego), który to fragment

zawiera informację pozwalającą na syntezę RNA (kwasu rybonukleinowego) i dalej

na wyprodukowanie określonego białka. Cały proces nazywany jest Centralnym

Dogmatem Biologii Molekularnej i przebiega następująco:

DNA zostaje przepisane(=przetłumaczone) na RNA w wyniku transkrypcji

(transkrypcja to przepisywanie DNA na RNA tak jak, na schemacie powyżej -> tzn.

w jądrze komórkowym jest DNA, więc trzeba go zamienić(przepisać) na RNA), a

następnie w wyniku translacji (syntezy) - RNA zamienia się na łańcuch aminokwasów

i białko (,a samo białko powstaje tylko z matrycowego RNA (takie RNA zawiera tylko

fragmenty kodujące dane białko)) (translacja-proces syntezy białka z matrycowego

RNA – schemat powyżej).

Ważnym pojęciem jest splicing. Zachodzi on podczas transkrypcji i polega

na wycinaniu z prekursorowego RNA (podczas transkrypcji powstaje kilka

rodzajów RNA, ponieważ pełni ono nie tylko funkcje kodujące białka ale także np.

regulatorowe; jednym z rodzajow jest prekursorowe RNA które zawiera również

fragmenty niekodujące i które trzeba zamienic na matrycowe RNA które sklada się

tylko z fragmentow kodujacych) fragmentów kodujących – eksonów i łączeniu w

nowy łańcuch RNA, co prowadzi do powstania matrycowego RNA(mRNA), które

może być przepisane na białko. Efekt opisanego procesu nazywa się ekspresją genu.

Mutacja jest skokową zmianą materiału genetycznego z możliwością dziedziczenia

zmian. Zmiany te dzieli się np. ze względu na mechanizm ich powstawania na

samorzutne i indukowane (np. pod wpływem promieniowania jonizującego). Jeśli

dotyczą pojedynczych zasad (mutacja punktowe) to dochodzi wówczas do substytucji

(podmiany), delecji (zasada wypada) lub insercji (dodania zasady.). Na poziomie

chromosomu mutacje mogą być strukturalne (czyli powodują zmianę struktury

chromosomu) lub liczbowe (powodują zmianę liczby chromosomów). Ze względu na

efekt wyróżnia się korzystne lub niekorzystne (letalne lub subletalne).

**25.10.2012 prof. dr hab. Piotr Targowski, OCT dla konserwacji zabytków - zabawka czy**

**narzędzie?**

1. Dlaczego współczesna technika konserwacji chętnie chce zastosować metodę OCT.

2. Jakie zalety niesie za sobą zastosowanie metody OCT.

Poniżej opracowane odpowiedzi na te pytania.

Ad.1.

Tradycyjne metody konserwacji zabytków i dzieł sztuki wymagają stosowania środków

zewnętrznych jako pomoc w badaniu danego obiektu. Stosowanie środków wymaga

ingerencji w badany obiekt, czyli jest metodą inwazyjną.

Metoda OCT jest nieinwazyjną, nieniszczącą metodą analizy dzieł sztuki i kultury.

Dodatkowo, w przypadku pojawienia się nowszej, lepszej metody analizowania obiektów

sztuki lub zwiększyła by się zdolność rozdzielcza OCT to działa nie są zniszczone przez

zastosowanie metody OCT.

Ad.2.

Główne zalety to (nie trzeba wszystkich wymieniać):

- brak konieczności nanoszenia środków i czynników pomocniczych,

- możliwość wykonania serii pomiarowej dla badanego obiektu przy tych samych

warunkach,

- szybkość analizy większa od tradycyjnych metod,

- nie ma ograniczeń co do wielkości badanego obiektu,

- analizę możemy przeprowadzić w dowolnych miejscach badanego obiektu,

- skanowanie wielokrotne umożliwia zbadanie objętościowe badanego obiektu,

- daje lepsze możliwości inspekcji w głąb materiału niż przy pomocy samego światła

widzialnego,

- dzięki wielokrotnemu rozproszeniu uzyskujemy dodatkowe informacje na temat

materiału obecnego w obiekcie (np. określenie pigmentu, koloru),

- dzięki analizie metodą OCT uzyskujemy kolejność i grubość warstw,

Dodatkowo:

- istnieje możliwość zlokalizowania poprawek pod warstwą wierzchnią,

możliwość sprawdzenia podkładu na jakim był malowany obraz (np, płótno, inne tkaniny,

szkło, drewno...),

- możliwość wykrycia manipulacji, oszustw i podróbek.

**8.11.2012 prof. Herald Aschemann, dr Andreas Rauh, Optimal control of distributed**

**parameter systems based on physical models.**

Proponowane pytania:

1. Co to sterowanie z regulatorem PID?

2. Co to jest sterowanie ILC?

3. Porównaj sterowanie ILC z PID? (zalety oraz wady).

Odpowiedzi:

Ad.1.

Regulator mający na celu minimalizację błędu (uchybu regulacji) wynikającego z różnicy

między wartością zadaną a otrzymywaną z układu.

Składa się z członów: proporcjonalnego P, całkującego I oraz różniczkującego D.

Wartości współczynników poszczególnych członów P, I oraz D dobiera się róznymi

metodami m.in. prób i błędów, metodą Ziglera-Nicolsa.

Ad.2.

Iterative Learning Control - metoda sterowania, dzięki której podczas wykonywania

procesu powtarzalnego obiekt uczy się zadawać takie wartości na wejściu uk. sterowania

aby otrzymać żadany wynik po określonej liczbie powtórzeń. Takie sterowanie ma w swoim

sposobie pracy regulacje. Sterownik bada z każdym powrórzeniem odpowiedź układu

(obiektu) i w kolejnym kroku modyfikuje wektor sterowania, który jest podawany na wejście

układu.

Ad.3.

Zarówno regulator PID jak i sterowanie ILC ma swoje zalety i wady:

PID:

- działa od uruchomienia układu,

- doboru parametrów PID dokonuje się przed procesem, przez co nie jest odporny na

zmianę warunkó pracy układu (uszkodzenia, zmiana warunków otoczenia),

- prosty do zaimplementowania, wymagana mała moc obliczeniowa.- nie jest przystosowany do pracy w nieliniowym odcinku pracy układu.

ILC: - daje lepsze wyniki niż regulator PID już po kilku powtórzeniach,

- sposób sterowania jest ciągle modyfikowany przez uczenie się w trakcie trwania

procesu powtarzalnego, dzieki czemu są odporne na zmianę warunków,

- wymagana większa moc obliczeniowa,

- jest odporny na nieliniowości układu.

**15.11.2012 prof. Andres Ayuela, Defects in Graphene**

1. Co to jest defekt topologiczny?
2. Jakie znaczenie mają w periodycznych strukturach gra fenowych płaskie pasma o energii Fermiego?

**22.11.2012 prof. dr hab. Adam Proń, Elektronika organiczna i hybrydowa (organicznonieorganiczna) = spojrzenie chemika**

1. Co to są OLEDy i na jakiej zasadzie działają. Przykład.

**29.11.2012 prof. dr hab. Marek Trippenbach, Wieloatomowe splątanie wytwarzane w**

**zderzeniach kondensatów Bosego Einsteina**

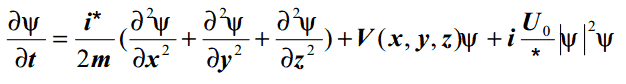
1. Co to jest kondensat Bosego Einsteina?

2. Omówić wykorzystanie kondensatu B-E w badaniu wieloatomowego splątania.

Ad. 1

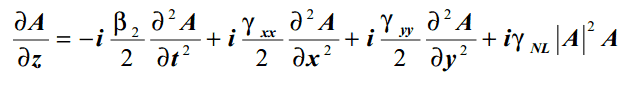
Obniżenie temp. Układu N atomów w pułapce atomowej powoduje, że coraz większa liczba

atomów obsadza stan podstawowy pułapki (pod warunkiem że atomy składają się z parzystej liczby fermionów, a więc jako całość stanowią bozony). W zerowej temperaturze (T=0) wszystkie atomy obsadzają stan podstawowy, jednak okazuje się, że T nie musi być równa zero, a mimo to N0 ≈ N bozonów znajdzie w stanie podstawowym. Odpowiada to zjawisku zwanemu kondensacją BosegoEinsteina. Zjawisko znane było od lat, jednak na spektakularną realizację eksperymentalną w zimnych gazach atomowych trzeba było czekać aż do 1995 roku. Do opisu dynamiki kondensatu BE z uwzględnieniem oddziaływujących ze sobą atomów stosuje się zależne od czasu równanie Grossa-Pitajewskiego będące podstawowym narzędziem w teoretycznym badaniu rozrzedzonych gazów bozonów w niskich temperaturach



Równanie GP jest podobne do równania Schrodingera, z wyjątkiem wyrazu nieliniowego, który opisuje odziaływanie pojedynczego atomu z resztą atomów. Energia tego oddziaływania jest proporcjonalna do gęstości chmury atomowej |\psi| przypadkach). Dlatego też ten dodatkowy wyraz nazywany jest energią średniego pola. Równanie to

ma taką samą strukturę jak równanie opisujące propagację światła w nieliniowym ośrodku



Porównując te dwa równaia przewidziano mieszanie czterech fal dla fal materii.

Ad. 2

→ Do opisu stanów splątanych dużej liczby cząstek bardzo trudno (jeśli w ogóle) jest zastosować metody/kryteria używane powszechnie dla układów kilku cząstek.

→ Splątanie stanów opisujących dużą liczbę cząstek próbuje się badać poprzez obserwowanie jak skaluje się wariancja obserwabli z liczbą cząstek w eksperymencie (a dokładnie jej dolne ograniczenie). Wariancja obserwabli \theta jest ograniczona od dołu \Delta \theta \geq F\_Q^{-1/2}, gdzie F\_Q to informacja Fishera.

→ Klasyczne ograniczenie na wariancje skaluje się z liczbą cząstek jak N^{-1/2} (tzw. shot noise scaling). Kwantowo, gdy istnieją korelacje między cząstkami, oddolne ograniczenie na wariancje obserwabli może skalować się z liczbą cząstek nawet jak N^{-1} (Heisenberg scaling). Własność tę można też wykorzystać w metrologii na łamanie fundamentalnych klasycznych limitów precyzji pomiaru.

→ Pomysł na eksperymentalne badanie splątania wieloatomowego z wykorzystaniem kondensatu B-E jest następujący: Wykorzystując rozpraszanie braggowskie (kondensat rozszczepia się na poruszającym się periodycznym potencjale wytworzonym przez dwie przeciwbieżne lekko odstrojone wiązki) zmieniamy pęd pewnej części cząstek z kondensatu na przeciwny (z \vec{k} na -\vec{k}). Następnie potrząsamy pułapką, na skutek czego z kondensatu, w wyniku zderzeń elastycznych, wylatują w przeciwnych kierunkach skorelowane (splątane) atomy. Kształt pułapki można dobrać tak, aby atomy te wylatywały tylko wzdłuż jednej osi co znacząco ułatwi ich detekcję. Dotychczas otrzymano ten efekt dla mieszania rzutów spinów (dla mieszania pędów badania jeszcze trwają ). Uwaga: wytwarzane w ten sposób splątane cząstki to nie są już cząstki znajdujące się w kondensacie tylko te które wyleciały poza kondensat ( wówczas do ich opisu nie wykorzystuje się pola średniego o którym mowa w Ad. 1 ).

**6.12.2012 dr Sylwia Zielińska-Kaniasty, Szybsze nie zawsze znaczy lepsze, czyli o świetle zatrzymanym**

1. Na przykładzie modelu atomu 3-poziomowego yjaśnić mechanizm elektromagnetycznie indukowanej przezroczystości ośrodków materialnych

**13.12.2012 prof. Michael Drewsen, Complete quantum state preparation of the single**

**molecular ions:Towards ultimate fs-laser experiments and ultra-cold chemistry**

1. Czym jest pułapka Paula?

Pułapka Paula (pułapka kwadrupolowa) wykorzystuje stałe i zmienne w czasie pole

elektryczne. Efektywny potencjał wytworzony przez to pole umożliwia pułapkowanie

naładowanych cząstek (jonów). W praktyce wykorzystywanych jest kilka rodzajów pułapek

Paula, jak np. kwadrupol 3D złożony z 3 elektrod (klasyczna pułapka Paula), pułapka liniowa

złożona z 4 równoległych prętów-elektrod (posiadająca dodatkowo jeszcze tzw. end-caps,

czyli elektrody uniemożliwiające ucieczkę jonów wzdłuż osi pułapki), czy pułapka planarna

(np. płytki drukowane, mikrochipy).

2. Jakie są techniki chłodzenia jonów w pułapkach?

- chłodzenie gazem buforowym (buffer-gas cooling) – w wyniku zderzeń z zimnymi atomami

gazu buforowego (np. helu) następuje zmniejszenie prędkości jonów w pułapce.

- chłodzenie dopplerowskie (Doppler cooling) – poruszające się jony oświetlone są

przeciwbieżnymi wiązkami laserowymi o odpowiedniej częstości (odstrojonej ku czerwieni

w stosunku do częstości wybranego przejścia w jonie). W wyniku absorpcji fotonów jony

doznają odrzutu i zostają spowolnione. Nazwa bierze się z faktu, że należy tu uwzględnić efekt Dopplera.

- chłodzenie na pasmach bocznych (sideband cooling) – wiązka laserowa (odstrojona

o częstość „oscylacyjną” od częstości wybranego przejścia w jonie) powoduje przejście

pomiędzy N-tym stanem oscylacyjnym stanu podstawowego a N-1-tym stanem oscylacyjnym

stanu wzbudzonego. W wyniku emisji spontanicznej następuje przejście do stanu N-1-

tego stanu podstawowego. W rezultacie tych przejść jon znajdzie się w najniższym stanie

oscylacyjnym stanu podstawowego.

- chłodzenie pośrednie (sympathetic cooling) – wykorzystuje zimne jony atomowe, które

umożliwiają schłodzenie jonów molekularnych w wyniku wzajemnego oddziaływania

coulombowskiego. Ogólniej zjawisko to zachodzi, jeśli mamy 2 lub więcej rodzaje jonów w

jednej pułapce.

- powyższe techniki umożliwiają chłodzenie translacyjne. Dla niektórych jonów molekularnych możliwe jest także chłodzenie rotacyjne. Wiązka laserowa o określonej częstości (zazwyczaj daleka podczerwień) przepompowuje obsadzenie z jednego ze wzbudzonych stanów rotacyjnych do stanu podstawowego, a pozostałe stany osiągają stan równowagi z tym opróżnianym.

3. Na czym polega spektroskopia dysocjacyjna stanów rotacyjnych?

Spektroskopia dysocjacyjna stanów rotacyjnych (REMPD – resonance-enhanced multiphoton dissociation) jest wykorzystywana do wyznaczania populacji różnych stanów rotacyjnych schłodzonych jonów. Jony ze stanu podstawowego są wzbudzane impulsem laserowym (np. nanosekundowym) do pośredniego stanu rezonansowego, a następnie do jednego ze stanów continuum, gdzie następuje dysocjacja. W rezultacie następuje zmniejszenie liczby spułapkowanych jonów proporcjonalne do obsadzenia poszczególnych stanów rotacyjnych.

**10.01.2013 dr hab. Jakub Tworzydło, Izolatory topologiczne**

1. Narysuj typowy przykład energii pasm (brzegu) dla izolatora topologicznego. Wyjaśnij różnicę między zwykłym stanem powierzchniowym a stanem izolatora topologicznego.

**24.01.2013 Marta Pelc, Rola brzegów i defektów w grafenie**

1. Co to jest brzeg minimalny wstęgi grafenowej?

**20.02.2013 Ks. prof. Michał Heller, Georges Lemaître: od Pierwotnego Atomu do kosmologii kwantowej**

1. Krótki życiorys Georga Lamaitre.

**21.02.2013 dr Jacek Zakrzewski, Piezoelektryczna spektroskopia fototermiczna w objętości i na powierzchni półprzewodników A2B6**

1. Czy efekt piezoelektryczny występuje spontanicznie w samoorganizujących się kropkach kwantowych InAs? Jeśli tak, to co jest jego źródłem?

**7.03.2013 dr inż. Łukasz Kłosowski, Badania jonów i ich małych zespołów w pułapkach**

**Kwadrupolowych**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **23.05.2013** | **prof. dr hab. Maciej Konacki** | **Centrum Astronomiczne im. M. Kopernika, PAN** | **Projekt Solaris** |
| 1. Jaki jest główny cel projektu SOLARIS? 2. Jakie znaczenie ma zwiększanie precyzji pomiarów mas gwiazd i ich planet? | | | |
| **16.05.2013** | **prof. dr hab. Andrzej Kajetan Wróblewski** | **Instytut Fizyki, Uniwersyetet Warszawski** | **Niezwykły rok 1913 i co dalej** |
| 1. Wymień trzy ważne odkrycia lub wprowadzone teorie fizyczne w 1913r. | | | |
| **09.05.2013** | **prof. dr hab. Elżbieta Zipper** | **Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski** | **Inżynieria kwantowa funkcji falowych w nanostrukturach** |
| 1. Jakie są możliwe sposoby kontroli lokalizacji funkcji falowej elektronu w strukturach typy DRN (dot-ring nanostructures)? | | | |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  | | | |
| **25.04.2013** | **dr inż. Artur Podhorodecki** | **Politechnika Wrocławska, Instytut Fizyki** | **Nanostruktury nieorganiczne domieszkowane jonami ziem rzadkich** |
| 1. Podaj przykład zastosowań półprzewodnikowych nanokryształów koloidalnych domieszkowanych jonami ziem rzadkich. | | | |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  | | | |
|  |  |  |  |
| **11.04.2013** | **dr Beata Derkowska-Zielińska** | **Instytut Fizyki, UMK** | **Trzeciorzędowe nieliniowe właściwości optyczne metaloftalocyjanin** |
| 1. Scharakteryzuj krótko termin „optyka nieliniowa” 2. Jakie znaczenie posiada badanie nieliniowych właściwości optycznych metaloftalocyjanin? | | | |
| **21.03.2013** | **prof. dr hab. Konrad Banaszek** | **Wydział Fizyki,Uniwersytet Warszawski** | **Nobel z fizyki 2012: Małe jest intrygujące!** |
| 1. Na czym polega „non-demolishing quantum experiment”? | | | |
| **14.03.2013** | **Prof. dr hab. Andrzej Blikle** | **Instytut Podstaw Informatyki PAN** | **Posłysz głos procesu losowego** |
| 1. Na czym polega projekt TQM? 2. Podaj przykład procesu produkcyjnego, w którym próby jego ulepszania nie oparte na wiedzy o przyczynach niskiej jakości, prowadzą do wręcz przeciwnych rezultatów. | | | |
|  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |