



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - quantum particle approach, PG_00052037						
Kierunek studiów	Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2022 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2023/2024		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	2	Język wykładowy			angielski angielski		
Semestr studiów	3	Liczba punktów ECTS			6.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Nanotechnologii i Inżynierii Materiałowej -> Zakład fizyki układów nieuporządkowanych						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Od odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. Maciej Bobrowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. Maciej Bobrowski					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	45.0	0.0	0.0	75
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Dodatkowe informacje: stacjonarne, jeśli potrzeba - online.							
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach		Praca własna studenta		RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	75	5.0		70.0		150
Cel przedmiotu	cele przedmiotu:  1. Przekazanie wiedzy o zastosowaniu metod obliczeniowych kwantowych w przypadku rozwiązywania problemów zmiany struktury elektronowej w układach materiałów opartych o molekuly i kryształy.  2. Nauczenie aksjomatów mechaniki kwantowej i ich stosowania.  3. Nauczenie powszechnie stosowanych metod kwantowych opartych o obliczane funkcje falowe i gęstości elektronowe: HF, CI, MCSCF, MPn, CC, DFT,  4. Nauczenie wykorzystywania powszechnie wykorzystywanych baz funkcji w obliczeniach kwantowych.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_U03] Posiada pogłębioną umiejętność posługiwania się zaawansowanymi pakietami oprogramowania specjalistycznego.	Student potrafi obsługiwać program do obliczeń kwantowych na komputerze wieloprocesorowym razem z zaawansowanymi programami do wizualizacji wyników obliczeń i budowania struktur.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K7_U06] Potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie – w ramach specjalności.	Student potrafi rozwiązać problem zadany przez prowadzącego przy pomocy programu do obliczeń kwantowych.	[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K7_W02] Ma pogłębioną, podbudowaną teoretycznie, szczegółową wiedzę w zakresie wybranego działu nanotechnologii oraz, w stopniu adekwatnym do potrzeb, w zakresie pokrewnych dziedzin nauki lub techniki.	Student ma pogłębioną wiedzę o metodach kwantowych stosowanych podczas obliczeń dla zmiany struktury elektronowej układów chemicznych budujących nanoukłady jak również o możliwościach i ograniczeniach takich metod.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji
[K7_W05] Posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur.	Student ma pogłębioną wiedzę o: definicji operatorów kwantowo-mechanicznych we współprzędnych sferycznych, macierzowej reprezentacji operatorów oraz o diagonalizacji i ortogonalizacji, o normalizacji funkcji falowych, jak również o: bazach funkcji Slatera i Gaussa, przybliżeniu Hartree-Focka-Roothana, orbitalach atomowych i molekularnych, metodach CI, metodach perturbacyjnych, metodach znajdowania i charakteryzowania stanów stacjonarnych.	[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji	
Treści przedmiotu	zastosowaniu metod obliczeniowych kwantowych w przypadku rozwiązywania problemów zmiany struktury elektronowej w układach materiałów opartych o molekuly i kryształy, aksjomaty mechaniki kwantowej i ich stosowanie, powszechnie stosowane metody kwantowe oparte o obliczane funkcje falowej i gęstości elektronowej: HF, CI, MCSCF, MPn, CC, DFT, bazy funkcji.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawowa wiedza z fizyki, matematyki, chemii.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	laboratorium	51.0%	50.0%
	egzamin	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Lucjan Piel, Idee Chemii Kwantowej, Wydawnictwo Naukowe PWN,  2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wydawnictwo Wiley, 2007,  3. C. J. Ballhausen, H. B. Gray, Molecular Orbital Theory, Wydawnictwo W. A. Benjamin Inc. 1964,	
	Uzupełniająca lista lektur	Yung-Kuo Lim, Problems and Solutions on Quantum Mechanics, Wydawnictwo World Scientific, 2005,	
	Adresy eZasobów	Podstawowe <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=32861">https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=32861</a> - materiały prowadzącego. Adresy na platformie eNauczanie: Materials science. Quantum particle approach. 2023. - Moodle ID: 32861 <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=32861">https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=32861</a>	

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Oblicz zadane komutatory we wsp. kartezjańskich i wsp. sferycznych,</li><li>2. Znormalizuj zadane funkcje falowe,</li><li>3. Zortogonalizuj zadane bazy funkcji,</li><li>4. Oblicz energie elektronowe zadanych konfiguracji elektronowych,</li><li>5. Jakie orbitale atomowe i molekularne zostaną wzięte pod uwagę w przypadku obliczeń zadanych stanów elektronowych cząsteczek w danej multipletowości?</li><li>6. Oblicz współczynniki rozwinięcia CI dla cząsteczki wodoru w zadanym stanie elektronowym.</li></ol>
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy