



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie materiałów metodami kwantowymi, PG_00058691						
Kierunek studiów	Inżynieria materiałowa, Inżynieria materiałowa, Inżynieria materiałowa						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2022/2023		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	1		Liczba punktów ECTS		3.0		
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)	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	15.0	0.0	45.0	0.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Dodatkowe informacje: zajęcia stacjonarne, wykłady + laboratoria. W przypadku wystąpienia stanu epidemiologicznego zajęcia można zorganizować w trybie na odległość (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	60		5.0		10.0	75
Cel przedmiotu	Nauczenie: idei metod kwantowych opartych o funkcje falowe dla układów od atomu wodoru (rozwiązania dokładne) do układów wieloatomowych, stosowania metod kwantowych dla molekuł w dowolnych stanach elektronowych, przewidywania i badania mechanizmów reakcji chemicznych, praktycznego zastosowania metod kwantowych do problemów z zakresu inżynierii materiałowej w konkretnych przykładach realizowanych w grupach ćwiczeniowych indywidualnie ale z porównaniem wyników na koniec zajęć.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_U07] potrafi planować i organizować pracę indywidualną oraz w zespołach	Student potrafi zaplanować przebieg obliczeń zadanych przez prowadzącego zadań obliczeniowych z zakresu inżynierii materiałowej przy wykorzystaniu serwera obliczeniowego: zbudować geometrie molekuł, zadać spiny i ładunki, zbudować pliki wejściowe, przeprowadzić obliczenia, przetrzymać dane pomiędzy komputerem PC i serwerem obliczeniowym, zanalizować graficznie uzyskane wyniki i porównać je z wynikami uzyskanymi przez innych studentów.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K7_U01] potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych oraz innych, właściwie dobranych źródeł, także w języku angielskim; potrafi integrować uzyskane informacje, dokonywać ich interpretacji, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie	Student potrafi porównać uzyskiwane dane po obliczeniach metodami kwantowymi z danymi eksperymentalnymi i z danymi uzyskanymi od innych studentów z tej samej grupy: opis reakcji na podstawie obliczonych mechanizmów reakcji, obliczenie podstawowych właściwości i porównanie ich z danymi literaturowymi, np. powinowactwa elektronowe, obsadzenia orbitali, bariery kinetyczne reakcji, wpływ struktury na reaktywność i trwałość molekuł.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU1] Ocena realizacji zadania
	[K7_W02] zna techniki doświadczalne, obserwacyjne i numeryczne oraz metody budowy modeli matematycznych właściwych dla inżynierii materiałowej; potrafi samodzielnie odtworzyć podstawowe twierdzenia i prawa oraz ich dowody	Student potrafi: wyprowadzić na kartce papieru energie całkowite zadanych konfiguracji elektronowych, wyprowadzić równania macierzowe w metodzie Ritz'a, normalizować funkcje falowe, uzasadnić stosowanie wybranych baz funkcji, zbudować molekuły, zadać układom spin, ładunek i prowadzić obliczenia zadanego mechanizmu reakcji chemicznej, znajdować punkt siodłowy procesu, analizować procesy pod kątem ich właściwości fizyko-chemicznych (stałe szybkości, energie, wpływ struktury), używać zaawansowanego programu liczącego metodami kwantowymi, analizować strukturę elektronową.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_K01] rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób. ma świadomość własnych ograniczeń i wie, kiedy zwrócić się do ekspertów, potrafi odpowiednio określić priorytety służące realizacji określonego przez siebie lub innych zadań	Student potrafi samodzielnie zbudować modele problematycznych układów molekularnych i na ten podstawie prowadzić badania naukowe przy pomocy metod kwantowych w inżynierii materiałowej. Student widzi, że istnieje bezpośredni związek pomiędzy zbudowanym i zbadanym modelem procesu i danymi eksperymentalnymi.	[SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK2] Ocena postępów pracy [SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy [SK4] Ocena umiejętności komunikacji, w tym poprawności językowej [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce

Treści przedmiotu	<p>Poniżej podzielono na godziny wykładów:</p> <p>1--2. Przykłady zastosowania metod kwantowych w realizacji projektów badawczych skupionych na: poszukiwaniu i charakteryzowaniu nowych, złożonych materiałów do zastosowań w elektrochemii, optyce, energetyce, elektronice.</p> <p>3--6. Rozwiązania r. Schrodingera dla rotatora sztywnego i atomu wodoru: harmoniki sferyczne, orbitale atomowe, wartości własne, właściwości,</p> <p>7--11. Metody wariacyjne: parametry nieliniowe i liniowe, równania macierzowe.</p> <p>12--14. Układy wieloelektronowe: wyznacznik Slatera, metoda Hartree-Focka, algorytm SCF,</p> <p>15. Metody mieszania konfiguracji i bazy funkcji. Kiedy musimy uciekać się do dokładniejszych metod.</p>											
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawowa wiedza z: fizyki, metod kwantowych, chemii, matematyki, obsługi komputera pod systemem Linuks.											
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Sposób oceniania (składowe)</th> <th>Próg zaliczeniowy</th> <th>Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>zaliczenie z egzaminu.</td> <td>51.0%</td> <td>50.0%</td> </tr> <tr> <td>sprawozdanie z laboratorium.</td> <td>51.0%</td> <td>50.0%</td> </tr> </tbody> </table>	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	zaliczenie z egzaminu.	51.0%	50.0%	sprawozdanie z laboratorium.	51.0%	50.0%		
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej										
zaliczenie z egzaminu.	51.0%	50.0%										
sprawozdanie z laboratorium.	51.0%	50.0%										
Zalecana lista lektur	<p>Podstawowa lista lektur</p> <p>Uzupełniająca lista lektur</p> <p>Adresy eZasobów</p>	<p>1. Lucjan Piela, Idee Chemii Kwantowej, wydawnictwo PWN, 2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wileys.</p> <p>1. C.J. Ballhausen, H. B. Gray, Molecular Orbital Theory, W. A. BENJAMIN, INC., 1965 2. W. Kołos, Chemia Kwantowa, PWN, Warszawa 1978,</p> <p>Uzupełniające Adresy na platformie eNauczanie: Modelowanie materiałów metodami kwantowymi - Moodle ID: 27970 https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=27970</p>										
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>1. Narysuj wykres energii w funkcji odległości międzyatomowych dla reakcji dysocjacji cząsteczki wody w dwa rodniki: OH oraz H. Zaznacz spiny i charakterystyczne punkty, w szczególności te, które odpowiadają minimom lokalnym.</p> <p>2. Wymień punkty charakterystyczne na krzywej energii reakcji, w której nie zmienia się całkowity spin przed i po reakcji. Opisz czym charakteryzują się te punkty.</p> <p>3. Znormalizuj funkcję $e^{-c \cdot x}$</p> <p>4. Oblicz energię elektronową i całkowitą zadanej konfiguracji cząsteczki wodoru.</p> <p>5. Oblicz energię elektronową zadanej konfiguracji układu 5 elektronów. Narysuj następnie konfigurację elektronową takiego stanu po redukcji jednym dodatkowym elektronem i również oblicz jego energię elektronową.</p> <p>6. Wyprowadź układ równań wiekowych w metodzie Ritza dla zbioru 3 orbitali molekularnych $\{f_1, f_2, f_3\}$, z których każdy jest znormalizowany, zaś cały zbiór nie jest ortogonalny.</p>											
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy											