



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie zjawisk fizycznych, PG_00031936						
Kierunek studiów	Fizyka Techniczna						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2023/2024		
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			angielski		
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Katedra Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwantowej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	prof. dr hab. Julien Guthmuller					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	prof. dr hab. Julien Guthmuller					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	30.0	0.0	0.0	45
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
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	45		5.0		25.0	75
Cel przedmiotu	Wprowadzenie studentów w tematykę podstaw metod teoretycznych i obliczeniowych służących do przeprowadzania kwantowych symulacji układów molekularnych. Studenci poznają metody chemii kwantowej i zastosują je do badania cząsteczek dwu- i wieloatomowych. Studenci nauczą się analizować rezultaty obliczeń i oceniać ich dokładność przez porównanie z wynikami doświadczalnymi.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu		Sposób weryfikacji i oceny efektu		
	[K7_U06] Potrafi zastosować zdobytą wiedzę z zakresu fizyki do zagadnień z obszaru innych nauk ścisłych, nauk przyrodniczych lub technicznych.		Wiedza zdobyta przez studentów może być stosowana w dziedzinie fizyki ciała stałego, nanotechnologii, chemii i biologii.		[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu		
	[K7_U05] Potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, badania eksperymentalne i symulacje komputerowe, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie.		Studenci zapoznają się z wykorzystaniem programów komputerowych do opisu właściwości molekularnych. Studenci nauczą się analizować rezultaty obliczeń i oceniać ich dokładność przez porównanie z wynikami doświadczalnymi.		[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU1] Ocena realizacji zadania		
	[K7_W04] Posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych stosowanych przy opisie i modelowaniu zjawisk fizycznych.		Studenci poznają teorie, aproksymacje i algorytmy niezbędne do symulacji zjawisk atomowych i molekularnych.		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		

Treści przedmiotu	<p>- Przybliżenie Borna-Oppenheimera i definicja powierzchni energii potencjalnej. Obliczenia krzywych energii potencjalnej, momentów dipolowych i długości wiązań cząsteczek dwuatomowych.</p> <p>- Metoda Hartree-Focka i równania Roothaana. Optymalizacja geometrii cząsteczek i orbitali atomowych. Obliczenia energii jonizacji i powinowactwa elektronowego.</p> <p>- Metody wychodzące poza przybliżenie Hartree-Focka. Bazy orbitali atomowych. Dokładne obliczenia energii jonizacji metodą sprzężonych klasterów (CC). Określenie zbieżności bazy orbitali atomowych.</p> <p>- Energie oscylacyjne w przybliżeniu oscylatora harmonicznego. Obliczenia częstotliwości drgań własnych, modów normalnych, widm podczerwieni i widm Ramana cząsteczek wieloatomowych.</p> <p>- Teoria funkcjonałów gęstości i zależna od czasu teoria funkcjonałów gęstości. Obliczenia stanów wzbudzonych, widm absorpcji i fluorescencji. Wpływ rozpuszczalnika.</p>											
Wymagania wstępne i dodatkowe	Brak											
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="456 669 794 696">Sposób oceniania (składowe)</th> <th data-bbox="799 669 1137 696">Próg zaliczeniowy</th> <th data-bbox="1142 669 1481 696">Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="456 703 794 730">Kolokwium zaliczeniowe</td> <td data-bbox="799 703 1137 730">55.0%</td> <td data-bbox="1142 703 1481 730">40.0%</td> </tr> <tr> <td data-bbox="456 736 794 763">Zaliczenie laboratorium</td> <td data-bbox="799 736 1137 763">55.0%</td> <td data-bbox="1142 736 1481 763">60.0%</td> </tr> </tbody> </table>			Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	Kolokwium zaliczeniowe	55.0%	40.0%	Zaliczenie laboratorium	55.0%	60.0%
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej										
Kolokwium zaliczeniowe	55.0%	40.0%										
Zaliczenie laboratorium	55.0%	60.0%										
Zalecana lista lektur	<table border="1"> <tr> <td data-bbox="456 781 794 1133">Podstawowa lista lektur</td> <td colspan="2" data-bbox="799 781 1481 1133"> Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN 2005 Jensen F., Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd. 2011 Szabo A. and Ostlund N. S., Modern Quantum Chemistry, Dover Publications, Inc. https://orcaforum.cec.mpg.de/ </td> </tr> <tr> <td data-bbox="456 1140 794 1167">Uzupełniająca lista lektur</td> <td colspan="2" data-bbox="799 1140 1481 1167">brak</td> </tr> <tr> <td data-bbox="456 1173 794 1200">Adresy eZasobów</td> <td colspan="2" data-bbox="799 1173 1481 1200">Adresy na platformie eNauczanie:</td> </tr> </table>			Podstawowa lista lektur	Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN 2005 Jensen F., Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd. 2011 Szabo A. and Ostlund N. S., Modern Quantum Chemistry, Dover Publications, Inc. https://orcaforum.cec.mpg.de/		Uzupełniająca lista lektur	brak		Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Podstawowa lista lektur	Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN 2005 Jensen F., Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd. 2011 Szabo A. and Ostlund N. S., Modern Quantum Chemistry, Dover Publications, Inc. https://orcaforum.cec.mpg.de/											
Uzupełniająca lista lektur	brak											
Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:											
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	brak											
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy											