



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - quantum particle approach, PG_00052037						
Kierunek studiów	Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2023 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2024/2025		
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	<p>Efekt kierunkowy</p> <p>[K7_W05] Posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur.</p>	<p>Efekt z przedmiotu</p> <p>Student ma pogłębioną wiedzę o: definicji operatorów kwantowo-mechanicznych we współrzędnych sferycznych, macierzowej reprezentacji operatorów oraz o diagonalizacji i ortogonalizacji, o normalizacji funkcji falowych, jak również o: bazach funkcji Słatera i Gaussa, przybliżeniu Hartree-Focka-Roothana, orbitalach atomowych i molekularnych, metodach CI, metodach perturbacyjnych, metodach znajdowania i charakteryzowania stanów stacjonarnych.</p>	<p>Sposób weryfikacji i oceny efektu</p> <p>[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji</p>
	<p>[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.</p>	<p>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.</p>	<p>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji</p>
	<p>[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.</p>	<p>Student potrafi rozwiązać problem zadany przez prowadzącego przy pomocy programu do obliczeń kwantowych.</p>	<p>[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu</p>
	<p>[K7_U03] Posiada pogłębioną umiejętność posługiwania się zaawansowanymi pakietami oprogramowania specjalistycznego.</p>	<p>Student potrafi obsługiwać program do obliczeń kwantowych na komputerze wieloprocesorowym razem z zaawansowanymi programami do wizualizacji wyników obliczeń i budowania struktur.</p>	<p>[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</p>
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
	egzamin	51.0%	50.0%
	laboratorium	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<p>1. Lucjan Piel, Idee Chemii Kwantowej, Wydawnictwo Naukowe PWN,</p> <p>2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wydawnictwo Wiley, 2007,</p> <p>3. C. J. Ballhausen, H. B. Gray, Molecular Orbital Theory, Wydawnictwo W. A. Benjamin Inc. 1964,</p>	
	Uzupełniająca lista lektur	Yung-Kuo Lim, Problems and Solutions on Quantum Mechanics, Wydawnictwo World Scientific, 2005,	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie: Materials science. Quantum particle approach. 2024 - Moodle ID: 40233 https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=40233	

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

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.