

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - quantum particle approach, PG_00052037						
Kierunek studiów	Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć specjalnościowych 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		
Semestr studiów	3		Liczba punktów ECTS		6.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> 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	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		
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 osiąganych 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	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	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.