



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie zjawisk fizycznych, PG_00031936						
Kierunek studiów	Fizyka Techniczna						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2025 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
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						
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	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Kolokwium zaliczeniowe	55.0%	40.0%
	Zaliczenie laboratorium	55.0%	60.0%
Zalecana lista lektur	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.  <a href="https://orcaforum.cec.mpg.de/">https://orcaforum.cec.mpg.de/</a>	
	Uzupełniająca lista lektur	brak	
	Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	brak		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.