

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie materiałów metodami kwantowymi, PG_00063526						
Kierunek studiów	Inżynieria materiałowa						
Data rozpoczęcia studiów	październik 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		polski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		2.0		
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	15.0	0.0	15.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1349 Moodle ID: 1349 Modelowanie materiałów metodami kwantowymi 2025/2026 https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1349						
	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	30		3.0		17.0	50
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_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 Ritza, 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
	[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, przesuwać 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

Treści przedmiotu	Poniżej podzielono na godziny wykładów (15 tygodni). Dla laboratoriów dane są niżej. 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. 3--6. Rozwiązania r. Schrodingera dla rotatora sztywnego i atomu wodoru: harmoniki sferyczne, orbitale atomowe, wartości własne, właściwości, 7--11. Metody wariacyjne: parametry nieliniowe i liniowe, równania macierzowe. 12--14. Układy wieloelektronowe: wyznacznik Slatera, metoda Hartree-Focka, algorytm SCF, 15. Metody mieszania konfiguracji i bazy funkcji. Kiedy musimy uciekać się do dokładniejszych metod. Dla laboratoriów (15 tygodni): 1. System operacyjny, konta studenckie na komputerach, łączenie sieciowe pomiędzy komputerami, łączenie z zewnątrz, konfiguracja powłoki, dostęp do oprogramowania specjalistycznego. 2. Układy współrzędnych, dane z wyobraźni i programy wprowadzające współrzędne automatycznie. 3. Obliczenia kwantowe na zadanych przykładach. 4. Omówienie zadań dla całej grupy i przydzielenie każdej osobie oddzielnego problemu. 5--15. Indywidualna praca każdego studenta nad swoim zadaniem zagadnieniem.		
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	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	zaliczenie z wykładu.	51.0%	50.0%
	sprawozdanie z laboratorium.	51.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur		
	1. Lucjan Piel, Idee Chemii Kwantowej, wydawnictwo PWN, 2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wileys.		
	Uzupełniająca lista lektur		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	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.		
	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.		
	3. Znormalizuj funkcję $e^{-c \cdot x}$		
	4. Oblicz energię elektronową i całkowitą zadanej konfiguracji cząsteczki wodoru.		
	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.		
	6. Wyprowadź układ równań wiekowych w metodzie Ritza dla zbioru 3 orbitali molekularnych $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3\}$, z których każdy jest znormalizowany, zaś cały zbiór nie jest ortogonalny.		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.