



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - quantum particle approach, PG_00052037						
Kierunek studiów	Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
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	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						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1343						
	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
	[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.	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.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[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.	Student potrafi rozwiązać problem zadany przez prowadzącego przy pomocy programu do obliczeń kwantowych. Student can for himself, solve the problems given by the teacher by means of software for quantum calculations.	[SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K7_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur .	Posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur . 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 Slatera i Gaussa, przybliżeniu Hartree-Focka-Roothana, orbitalach atomowych i molekularnych, metodach CI, metodach perturbacyjnych, metodach znajdowania i charakteryzowania stanów stacjonarnych.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_U03] posiada pogłębioną umiejętność posługiwania się zaawansowanymi pakietami oprogramowania specjalistycznego.	Student potrafi obsługiwać program do obliczeń kwantowych na komputerze wieloprocesorowym razem z zaawansowanymi programami do wizualizacji wyników obliczeń i budowania struktur. Student can maintain software for quantum calculations on many-processor computer along with advanced visualization software which is used for displaying partial results and for building the structures.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania

Treści przedmiotu	<p>Treści przedmiotu - wykład Poniżej podzielono na godziny wykładów:</p> <p>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.</p> <p>3--6. Rozwiązania r. Schrodingera dla rotatora sztywnego i atomu wodoru: harmoniki sferyczne, orbitale atomowe, wartości własne, właściwości,</p> <p>7--11. Metody wariacyjne: parametry nieliniowe i liniowe. Reprezentacja macierzowa.</p> <p>12--14. Układy wieloelektronowe: wyznacznik Slatera, metoda Hartree-Focka, algorytm SCF,</p> <p>15. Metody mieszania konfiguracji i bazy funkcji.</p> <p>Laboratoria podzielone są w następujący sposób (według tygodni zajęć):</p> <p>1. Informacje o systemie operacyjnym Linuks, organizacji sieci informatycznej wraz z dostępem do serwera obliczeniowego i dostępem do danych z zewnątrz, założenie kont na serwerze obliczeniowym.</p> <p>2. Geometria molekuł i współrzędne molekuł: kartezjańskie i wewnętrzne, oraz pomoc ze strony programu Molden.</p> <p>3. Przykładowe obliczenia na serwerze obliczeniowym dla zadanych przez prowadzącego przypadków.</p> <p>4. Omówienie wspólnego zagadnienia projektowego i podział zadań (dla każdego studenta inne zadanie).</p> <p>5--15. Obliczenia indywidualne prowadzone niezależnie przez każdego ze studentów nad zadaniem zagadnieniem.</p>		
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		

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Wykłady:</p> <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. <p>Laboratoria:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Oblicz mechanizm reakcji polimeryzacji zadanego polimeru. 2. Porównaj energie stanów elektronowych ferromagnetycznych tlenków żelaza (III).
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.