



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Theoretical principles of nanotechnology, PG_00058864						
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				5.0	
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia				egzamin	
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. inż. Jacek Dziedzic					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. inż. Jacek Dziedzic					
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	30.0	0.0	0.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1131">https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1131</a>						
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	60		5.0		60.0	125
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z metodami kwantowomechanicznymi szeroko wykorzystywanymi w teoretycznej i symulacyjnej analizie układów w nanoskali. Po krótkim przypomnieniu podstaw mechaniki kwantowej, wychodząc z założeń mechaniki kwantowej ukazujemy trudności związane z bezpośrednimi próbami zastosowania równania Schroedingera i metod funkcji falowej, eksponujemy możliwości, które otwierają twierdzenia Hohenberga-Kohna, a następnie omawiamy praktyczne aspekty najbardziej popularnej w zastosowaniach inżynierskich i badawczych metody ab initio teorii funkcjonału gęstości (DFT).						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_U01] potrafi uczyć się samodzielnie, pozyskiwać i integrować informacje z literatury, baz danych oraz innych właściwie dobranych źródeł (w językach polskim i angielskim). Posiada umiejętność krytycznej analizy i selekcji informacji.	Potrafi we własnym zakresie pozyskać konieczne informacje z literatury i poddać je krytycznej analizie.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu
	[K7_W04] posiada praktyczną i teoretyczną znajomość fizycznych i chemicznych metod eksperymentalnych nanotechnologii .	Posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę na temat symulacyjnych podejść do badania układów w nanoskali przy użyciu metod eksperymentu in silico. Umie wykorzystać metodę teorii funkcjonału gęstości do wyznaczenia struktury elektronowej nieskomplikowanych układów.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[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.	Posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę w zakresie teoretycznych i symulacyjnych kwantowomechanicznych podejść do badania układów w nanoskali. Potrafi zastosować metodę teorii funkcjonału gęstości do wyznaczenia struktury elektronowej nieskomplikowanych układów.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej

**Wykład:**

Dlaczego nanotechnologia?

Mechanizmy odpowiedzialne za unikatowość układów w skali nano.

Przykłady zastosowań i obietnic nanotechnologii.

Trudności eksperymentalne w nanotechnologii.

Oddziaływania w materii.

Pytania, na które chcemy znać odpowiedzi w teoretycznych badaniach nanostruktur.

Odpowiedzi, które musimy znać w teoretycznych badaniach nanostruktur.

Równanie dynamiczne.

Krajobraz metod obliczeniowych w fizyce.

Przypomnienie podstaw mechaniki kwantowej: funkcja falowa, interpretacja statystyczna, równanie Schroedingera, operatory, wartość oczekiwana.

Układy wielu ciał. Chemia molekularna. Jednostki atomowe.

Hamiltonian molekularny.

Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Powierzchnia energii potencjalnej.

Spin.

Hamiltonian elektronowy. Potencjał zewnętrzny.

Gęstość elektronowa.

Twierdzenia Hohenberga-Kohna.

Bezorbitalowa (czysta) teoria funkcjonału gęstości (OF-DFT).

Metoda mnożników Lagrangea.

Wymiana. Korelacja.

Model Thomasa-Fermiego i Thomasa-Fermiego-Diraca.

DFT w ujęciu Kohna-Shama (KS-DFT).

Elektrony oddziałujące vs. nieoddziałujące. Elektrony Kohna-Shama.

	<p>Orbital molekularny. Iloczyn Hartreego. Wyznacznik Slatera.</p> <p>Potencjał efektywny. Energia korelacyjno-wymienna.</p> <p>Trudności KS-DFT. Diagonalizacja. Samouzgodnienie.</p> <p>Minimalizacja energii w KS-DFT.</p> <p>Korelacja i wymiana: LDA, GGA, m-GGA, funkcjonały hybrydowe.</p> <p>Pseudopotencjał.</p> <p>Baza funkcyjna. LCAO. Bazy Slatera i Gaussa. Całki elektronowe. Kontrakcje.</p> <p>Baza minimalna, poszerzona, z rozszczepieniem, funkcje polaryzacyjne, funkcje rozmyte.</p> <p>Baza Pople'owska, baza Duninga.</p> <p>Granica bazy zupełnej.</p> <p>Błąd superpozycji bazy.</p> <p>Inne bazy: NAO, falki Daubechies, NGWF, fale płaskie, LMTO.</p> <p>Metody post-HF (pokrótce).</p> <p><b>Ćwiczenia:</b></p> <p>Fale de Brogliea. Zależne i niezależne od czasu równanie Schroedingera. Wartości oczekiwane. Minimalizacja funkcji z więzami, mnożniki Lagrangea. Zasada wariacyjna. Elektrostatyka ładunków punktowych i rozciągniętych gęstości ładunku. Model Thomasa-Fermiego. Poprawka Diraca. Baza minimalna. Orbitale Slatera i Gaussa. Baza fal płaskich. Całki nakładania. Całki jednoelektronowe.</p>											
<p><b>Wymagania wstępne i dodatkowe</b></p>	<p>Wstępne: Podstawowe wiadomości z analizy matematycznej (całka Riemanna, minimalizacja funkcji, pochodne cząstkowe i zupełne, różniczka). Podstawowe wiadomości z algebry liniowej (przestrzeń liniowa, wektor, baza, kombinacja liniowa). Podstawowe wiadomości z mechaniki klasycznej (siła, przyspieszenie, potencjał) i mechaniki kwantowej (funkcja falowa, równanie Schroedingera, obserwabla, superpozycja, operatory). Podstawy elektrostatyki (pole elektryczne, potencjał, praca, oddziaływanie kulombowskie). Chemia na poziomie szkoły średniej (atom, cząsteczka, orbital, wiązanie, hybrydyzacja).</p> <p>Dodatkowe: Metody numeryczne, metody wariacyjne, fizyka statystyczna.</p>											
<p><b>Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się</b></p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="448 1635 796 1671">Sposób oceniania (składowe)</th> <th data-bbox="796 1635 1144 1671">Próg zaliczeniowy</th> <th data-bbox="1144 1635 1489 1671">Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="448 1671 796 1706">Egzamin pisemny</td> <td data-bbox="796 1671 1144 1706">50.0%</td> <td data-bbox="1144 1671 1489 1706">50.0%</td> </tr> <tr> <td data-bbox="448 1706 796 1765">Dwa kolokwia zaliczeniowe (ćwiczenia)</td> <td data-bbox="796 1706 1144 1765">50.0%</td> <td data-bbox="1144 1706 1489 1765">50.0%</td> </tr> </tbody> </table>			Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	Egzamin pisemny	50.0%	50.0%	Dwa kolokwia zaliczeniowe (ćwiczenia)	50.0%	50.0%
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej										
Egzamin pisemny	50.0%	50.0%										
Dwa kolokwia zaliczeniowe (ćwiczenia)	50.0%	50.0%										
<p><b>Zalecana lista lektur</b></p>	<table border="1"> <tbody> <tr> <td data-bbox="448 1769 796 1899">Podstawowa lista lektur</td> <td colspan="2" data-bbox="796 1769 1489 1899"> <ol style="list-style-type: none"> <li>David J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, 2<sup>nd</sup> ed, Pearson Prentice Hall, 2004.</li> <li>Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007.</li> <li>R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Springer, 2013.</li> </ol> </td> </tr> <tr> <td data-bbox="448 1899 796 2029">Uzupełniająca lista lektur</td> <td colspan="2" data-bbox="796 1899 1489 2029"> <ol style="list-style-type: none"> <li>Tadmor, Miller, Modeling Materials, Cambridge, 2011.</li> <li>Materiały rozdane przez prowadzącego.</li> </ol> </td> </tr> <tr> <td data-bbox="448 2029 796 2065">Adresy eZasobów</td> <td colspan="2" data-bbox="796 2029 1489 2065"></td> </tr> </tbody> </table>			Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>David J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, 2<sup>nd</sup> ed, Pearson Prentice Hall, 2004.</li> <li>Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007.</li> <li>R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Springer, 2013.</li> </ol>		Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>Tadmor, Miller, Modeling Materials, Cambridge, 2011.</li> <li>Materiały rozdane przez prowadzącego.</li> </ol>		Adresy eZasobów		
Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>David J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, 2<sup>nd</sup> ed, Pearson Prentice Hall, 2004.</li> <li>Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007.</li> <li>R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Springer, 2013.</li> </ol>											
Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>Tadmor, Miller, Modeling Materials, Cambridge, 2011.</li> <li>Materiały rozdane przez prowadzącego.</li> </ol>											
Adresy eZasobów												

Przykładowe zagadnienia/  
przykładowe pytania/  
realizowane zadania

1. Wyjaśnij pokrótce, na jakie trudności napotyka analiza eksperymentalna nanostruktur.
2. Wyjaśnij, dlaczego układy w skali nanometrycznej zachowują się inaczej od układów makroskopowych. Podaj przykłady odpowiedzialnych mechanizmów.
3. Podaj kilka przykładów materiałów albo nanostruktur o nietypowych właściwościach, wyjaśnij krótko przyczyny ich odmiennego zachowania.
4. Które z czterech oddziaływań podstawowych są istotne, a które nieistotne w skali nano? Dlaczego?
5. Co to jest równanie dynamiczne? Opisz pokrótce cztery główne regiony i odpowiadające im równania dynamiczne w zależności od masy i prędkości badanych cząstek?
6. Jakie są główne różnice między klasycznymi a kwantowymi metodami obliczeniowego badania układów w skali nano?
7. Omów interpretację wartości oczekiwanej w mechanice kwantowej. W jaki sposób możemy zmierzyć wartość oczekiwaną jakiejś obserwabli? W jaki sposób możemy ją obliczyć?
8. Kiedy zbiór wektorów w przestrzeni liniowej jest liniowo zależny, a kiedy liniowo niezależny?
9. Co to jest operator rzutowania? Jaką ma postać? Jaki jest wynik działania operatora rzutowania na wektor? Podaj i zinterpretuj relację zupełności.
10. Zapisz ogólny wzór na całkowity kwantowomechaniczny hamiltonian cząsteczki o  $N_{at}$  atomach i  $N_{el}$  elektronach w wybranych przez Ciebie jednostkach. Zdefiniuj użyte symbole. Co reprezentuje każdy z członów?
11. Jakie założenia i uproszczenia prowadzą do przybliżenia Borna-Oppenheimera? Podaj przykład sytuacji, w której przyjęte uproszczenia zawodzą.
12. Jakie są konsekwencje przyjęcia przybliżenia Borna-Oppenheimera? Wyjaśnij pojęcie powierzchni energii potencjalnej (PES).
13. Mając daną funkcję falową układu  $N_{el}$  oddziałujących elektronów, z jakiego wzoru możemy wyznaczyć energię elektronową? A z jakiego gęstość elektronową?
14. Zapisz kwantowomechaniczny hamiltonian cząsteczki metanu ( $CH_4$ ) w jednostkach atomowych. Zdefiniuj użyte symbole. Za co odpowiada każdy z zapisanych przez Ciebie członów?
15. Jakie są główne konsekwencje faktu, że elektrony posiadają spin?
16. W kontekście zagadnienia elektronowego, co to jest potencjał zewnętrzny? Zapisz wzór na potencjał zewnętrzny dla cząsteczki  $N_2O$ . Zdefiniuj użyte symbole.
17. Jakie informacje, i w jaki sposób, możemy wydedukować znając gęstość elektronową cząsteczki?
18. Czy umiemy ściśle wyznaczyć energię cząsteczki znając tylko jej gęstość elektronową? Dlaczego tak albo dlaczego nie?
19. Czego dotyczy i co mówi pierwsze twierdzenie Hohenberga-Kohna?
20. Wyprowadź pokrótce pierwsze twierdzenie Hohenberga-Kohna.
21. Czym jest uniwersalny funkcjonal Hohenberga-Kohna? Na czym, w tym kontekście, polega uniwersalność?
22. Podaj i omów krótko zasadę wariacyjną dla funkcji falowych i zasadę wariacyjną dla gęstości elektronowych. Jakie są ich konsekwencje?
23. Na jakie trzy składniki jest tradycyjnie rozdzielana energia oddziaływania elektrony-elektrony? Omów te trzy składniki oraz wyjściową energię oddziaływania (tę rozdzielaną). Podaj wzory tam, gdzie to możliwe.
24. Omów procedurę minimalizacji energii w czystym (bezorbitalowym) DFT. Minimum jakiego funkcjonału poszukujemy w praktyce?
25. Podaj wyrażenie na funkcjonal gęstości Thomasa-Fermiego. Scharakteryzuj krótko każdy z członów.
26. Jakie główne uproszczenia zakłada model Thomasa-Fermiego? Jakie są jego przewidywania?
27. Omów krótko poprawki do modelu Thomasa-Fermiego zaproponowane przez Diraca i Weizsäckera.
28. Jakie są główne założenia modelu pure (orbital-free) DFT? Jakie problemy napotyka ten model w praktyce?
29. Omów pokrótce pomysł Kohna i Shama, który umożliwia obejście głównej bolączki czystego (bezorbitalowego) DFT.
30. W jaki sposób rozwiązujemy zagadnienie elektronów nieoddziałujących?
31. Jak wyglądają funkcje falowe: a) Hartreego, b) Slatera dla układu elektronów nieoddziałujących? Co jest nie tak z funkcją Hartreego?
32. Jak dana jest gęstość elektronowa układu elektronów nieoddziałujących opisanych funkcją falową Slatera? Jakie założenie jest potrzebne aby otrzymać to wyrażenie?
33. Co to jest potencjał efektywny w modelu Kohna i Shama? Jaka jest jego rola?
34. Co to jest potencjał Hartreego w modelu Kohna i Shama?
35. Co to jest potencjał korelacyjno-wymienny w modelu Kohna i Shama? Jaka jest jego rola?
36. Porównaj pokrótce trzy zagadnienia: a) elektronów oddziałujących, b) elektronów nieoddziałujących, c) elektronów Kohna i Shama. Jakie są zalety i wady każdego z tych trzech podejść?
37. Jak różni się wyrażenie na energię kinetyczną elektronów w zależności od przyjętego modelu: a) elektronów oddziałujących w metodach funkcji falowej, b) elektronów w modelu Hohenberga i Kohna (pure DFT), c) elektronów w modelu Kohna i Shama.
38. Scharakteryzuj człon energetyczny  $Exc$  (korelacyjno-wymienny) w modelu Kohna i Shama.
39. Wymień i krótko opisz główne trudności DFT w ujęciu Kohna i Shama.
40. Omów procedurę minimalizacji energii w DFT Kohna i Shama. Minimum jakiego funkcjonału poszukujemy w praktyce?
41. Jak DFT w ujęciu Kohna i Shama różni się od czystego (bezorbitalowego) DFT? Jakie są zalety, a jakie wady każdego z tych podejść?
42. W jaki sposób radzimy sobie z problemem kwadratowo rosnącej liczby mnożników Lagrangea, na który napotykamy podczas minimalizacji funkcjonału w DFT Kohna i Shama? Na jakie trudności napotyka z kolei rozwiązanie tego problemu?
43. Na czym polega procedura samouzgodnienia w modelu DFT Kohna i Shama? Z czego wynika konieczność stosowania tej procedury?
44. Na czym polega przybliżenie lokalnej gęstości (LDA) w modelu DFT Kohna i Shama? Co sądzisz o jakości tego przybliżenia?
45. Na czym polega uogólnione przybliżenie gradientowe (GGA) w modelu DFT Kohna i Shama? Co sądzisz o jakości tego przybliżenia?
46. Czym różnią się funkcjonały korelacyjno-wymienne stereotypowo stosowane przez środowisko chemików i środowisko fizyków?
47. Co to są funkcjonały meta-GGA?
48. Czym są hybrydowe funkcjonały korelacyjno-wymienne? Jakie są ich główne zalety i wady?
49. Omów pokrótce znane Ci szczeble drabiny Jakubowej funkcjonałów korelacyjno-wymiennych. Co znajduje się na obydwu końcach drabiny?
50. Co to znaczy, że funkcjonal korelacyjno-wymienny jest Nielokalny? Semilokalny? Lokalny?
51. Jaka jest motywacja przyjęcia przybliżenia pseudopotencjalnego? Na czym polega to przybliżenie?
52. Czego oczekujemy od dobrego pseudopotencjału?

	<p>53. Jakie są niedogodności związane z przyjęciem przybliżenia pseudopotencjalnego? Jakie są niedogodności związane z nieprzyjęciem tego przybliżenia?</p> <p>54. Co to znaczy, że pseudopotencjał jest Nielokalny? Semilokalny? Lokalny?</p> <p>55. Co to znaczy, że pseudopotencjał jest miękki albo twardy? Jakie są zalety/trudności miękkich/twardych pseudopotencjałów?</p> <p>56. Omów pokrótce techniki, które pozwalają łagodzić przybliżenie pseudopotencjalne.</p> <p>57. Co to jest i do czego służy przybliżenie LCAO?</p> <p>58. Porównaj orbitale Slatera i orbitale Gaussa. Wzory, zalety, wady. Opisz użyte symbole.</p> <p>59. Czym są całki nakładania? Podaj wzory i interpretację.</p> <p>60. Czym są całki jednoelektronowe? Podaj wzory i interpretację.</p> <p>61. Czym różnią się a) radialna funkcja Gaussa, b) prymitywna funkcja Gaussa, c) skonstruktowany orbital funkcji Gaussa?</p> <p>62. Na czym polega kontrakcja orbitali Gaussa? Po co ją stosujemy?</p> <p>63. Co to jest baza minimalna? Jakie są zalety a jakie wady stosowania bazy minimalnej?</p> <p>64. Co to jest baza poszerzona? Czym różni się baza DZ od bazy VDZ?</p> <p>65. Czym są polaryzacyjne funkcje bazowe? W jakim celu się je stosuje?</p> <p>66. Czym są rozmyte funkcje bazowe? W jakim celu się je stosuje?</p> <p>67. Napisz wszystko, co wiesz o bazach Poplewskich.</p> <p>68. Napisz wszystko, co wiesz o bazach spójnych ze względu na korelację (korelacyjno-konsystentnych).</p> <p>69. W jaki sposób radzimy sobie z faktem, że w praktyce zmuszeni jesteśmy korzystać z baz niepełnych?</p> <p>70. Opisz zjawisko błędu superpozycji bazy (BSSE). Jak możemy radzić sobie z tym problemem?</p> <p>71. Czym są atomowe orbitale numeryczne (NAO)? Jakie są zalety i wady związane z wykorzystywaniem ich w roli bazy funkcyjnej?</p> <p>72. Napisz wszystko, co wiesz o bazie nieortogonalnych, uogólnionych funkcji Wanniera (NGWF).</p> <p>73. Na czym polega optymalizacja bazy in situ? Jakie są zalety i wady takiej optymalizacji?</p> <p>74. Wyjaśnij krótko na czym polega efekt pudełka na jajka (eggbox effect).</p> <p>75. Omów zalety i wady bazy fal płaskich w porównaniu z bazami określonymi w przestrzeni rzeczywistej.</p> <p>76. Wyjaśnij na czym polega baza fal płaskich i kiedy można ją stosować.</p> <p>77. Czym jest energia kinetyczna odcięcia w bazie fal płaskich? W jakim celu się ją przyjmuje?</p> <p>78. Wyjaśnij pokrótce na czym polega podejście LMTO. Jakie trudności wiążą się z jego stosowaniem?</p> <p>79. Podaj przykłady programów umożliwiających obliczenia DFT w bazach (a) fal płaskich, (b) GTO, (c) NAO.</p> <p>80. Krótko streść swoją wiedzę w temacie metod uwzględniających korelację elektronową (post-HF).</p>
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.