POLITECHNIKA GDAŃSKA

Karta przedmiotuuuu

Nazwa i kod przedmiotu	Teoretyczne podstawy nanotechnologii , PG_00069740		
Kierunek studiów	Nanotechnologia		
Data rozpoczęcia studiów	luty 2026 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	1	Liczba punktów ECTS	4.0
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. 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	0.0	15.0	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	50.0	100

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_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] Assessment of factual knowledge
	[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] Assessment of factual knowledge
	[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] Assessment of ability to analyse information [SU3] Assessment of ability to use knowledge gained from the subject

Treści przedmiotu	1. Dlaczego nanotechnologia? 2. Mechanizmy odpowiedzialne za unikatowość układów w skali nano. 3. Przykłady zastosowań i obietnic NT. 4. Trudności eksperymentalne w NT. 5. Oddziaływania w materii. 6. Pytania, na które chcemy znać odpowiedzi w teoretycznych badaniach nanostruktur. 7. Odpowiedzi, które musimy znać w teoretycznych badaniach nanostruktur. 8. Równanie dynamiczne. 9. Krajobraz metod obliczeniowych w fizyce. 10. Przypomnienie podstaw mechaniki kwantowej: funkcja falowa, interpr. statystyczna, r-nie Schroedingera, operatory, wartość oczekiwana, przestrzeń liniowa, baza, iloczyn skalarny, ortogonalność i ortonormalność, operatory jako macierze, przestrzeń o nieskończonym wymiarze. 11. Układy wielu ciał. Chemia molekularna. Jednostki atomowe. 12. Hamiltonian molekularny. 13. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Powierzchnia energii potencjalnej. 14. Spin. 15. Hamiltonian elektronowy. Potencjał zewnętrzny. 16. Gęstość elektronowa. 17. Twierdzenia Hohenberga-Kohna. 18. Bezorbitalowa (czysta) teoria funkcjonału gęstości (OF-DFT). 19. Wymiana. Korelacja. 20. Model Thomasa-Fermiego i Thomasa-Fermiego-Diraca. 21. DFT w ujęciu Kohna-Shama (KS-DFT). 22. Elektrony oddziałujące vs. nieoddziałujące. Elektrony Kohna-Shama. 23. Orbital molekularny. Iloczyn Hartreego. Wyznacznik Slatera. 24. Potencjał efektywny. Energia korelacyjno-wymienna. 25. Trudności KS-DFT. Diagonalizacja. Samouzgodnienie. 26. Minimalizacja energii w KS-DFT. 27. Korelacja i wymiana: LDA, GGA, m-GGA, funkcjonały hybrydowe. 28. Drabina Jakubowa funkcjonałów. 29. Przybliżenie rdzeń-el. walencyjne. 30. Pseudopotencjał. 31. Motywacja stosowania pseudopotencjałów, trudności związane z ich stosowaniem. 32. Pojęcie uniwersalności (transferability), pseudopotencjały twarde i miękkie. 33. Baza funkcyjna. LCAO. Bazy Slatera i Gaussa. Całki elektronowe. Kontrakcje. 34. Baza minimalna, poszerzona, z rozszczepieniem, funkcje polaryzacyjne, funkcje rozmyte. 35. Baza Pople'owska, baza Duninga. 36. Granica bazy zupełnej. 37. Błąd superpozycji bazy. 38. Inne bazy: NAO, falki Daubechies, NGWF, fale płaskie, LMTO. 39. Metody post-HF (pokrótce). Tworzenie prostych struktur wejściowych. Dobór kluczowych parametrów obliczeń struktury elektronowej: odcięcia energii kinetycznej, liczby orbitali w bazie minimalnej, rozmiaru pudła symulacyjnego. Samouzgodnienie. Metody minimalizacji energii stosowane dla układów z przerwą energetyczną i bez niej. Wizualizacja.
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawowe wiadomości z analizy matematycznej (całka Riemanna, minimalizacja funkcji jednej zmiennej, pochodne cząstkowe i zupełne, różniczka). Podstawowe wiadomości z algebry liniowej (przestrzeń liniowa, wektor, baza, kombinacja liniowa). Podstawowe wiadomości z mechaniki klasycznej (siła, przyspieszenie, energia, potencjał) i mechaniki kwantowej (funkcja falowa, równanie Schrödingera, obserwable, superpozycja, operatory). Podstawy elektrostatyki (pole elektryczne, potencjał, praca, oddziaływanie kulombowskie). Chemia na poziomie szkoły średniej (atom, cząsteczka, orbital, wiązanie, hybrydyzacja). Dodatkowe: Metody numeryczne, metody wariacyjne, fizyka statystyczna.

Sposoby i kryteria oceniania osiąganych efektów uczenia się

Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
sprawozdania z ćwiczeń laboratoryjnych	50.0%	50.0%
egzamin pisemny	50.0%	50.0%

Zalecana lista lektur

Podstawowa lista lektur	1. Lucjan Piela, Idee Chemii Kwantowej, PWN, 2011. 2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wydawnictwo: Wiley, 2007. 3. Christopher Cramer, Essentials of Computational Chemistry, Wydawnictwo: Wiley, 2004.

	Uzupełniająca lista lektur	1. Tadmor, Miller, Modeling Materials, Cambridge, 2011. 2. Scharoch, Peisert, Metody obliczeniowe ab initio w fizyce struktur atomowych (skrypt). 3. Grimme, Density functional theory with London dispersion corrections, WIREs Computational Molecular Science 1 (2011). 4. Rick, Stewart, Reviews in Computational Chemistry, Volume 18, Polarizability in computer simulations.
	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 zależność 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 zintepretuj relację zupełności. 10. Zapisz ogólny wzór na całkowity kwantowomechaniczny hamiltonian cząsteczki o Nat atomach i Nel 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 Nel oddziałujących elektronów, z jakiego wzoru możemy wyznaczyć energię elektronową? A z jakiego gęstość elektronową? 14. Zapisz kwantowomechaniczny hamiltonian cząsteczki metanu (CH4) 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 N2O. 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 funkcjonał 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 odziaływania 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 funkcjonał 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 funkcjonał korelacyjno-wymienny jest nielokalny? Semilokalny? Lokalny? 51. Jaka jest motywacja przyjęcia przybliżenia pseudopotencjalnego? Na czym polega to przybliżenie? 52. Czego oczekujemy od dobrego pseudopotencjału?

	53. Jakie są niedogodności związane z przyjęciem przybliżenia pseudopotencjalnego? Jakie są niedogodności związane z nieprzyjęciem tego przybliżenia? 54. Co to znaczy, że pseudopotencjał jest nielokalny? Semilokalny? Lokalny? 55. Co to znaczy, że pseudopotencjał jest miękki albo twardy? Jakie są zalety/trudności miękkich/twardych pseudopotencjałów? 56. Omów pokrótce techniki, które pozwalają łagodzić przybliżenie pseudopotencjalne. 57. Co to jest i do czego służy przybliżenie LCAO? 58. Porównaj orbitale Slatera i orbitale Gaussa. Wzory, zalety, wady. Opisz użyte symbole. 59. Czym są całki nakładania? Podaj wzory i interpretację. 60. Czym są całki jednoelektronowe? Podaj wzory i interpretację. 61. Czym różnią się a) radialna funkcja Gaussa, b) prymitywna funkcja Gaussa, c) skontraktowany orbital funkcji Gaussa? 62. Na czym polega kontrakcja orbitali Gaussa? Po co ją stosujemy? 63. Co to jest baza minimalna? Jakie są zalety a jakie wady stosowania bazy minimalnej? 64. Co to jest baza poszerzona? Czym różni się baza DZ od bazy VDZ? 65. Czym są polaryzacyjne funkcje bazowe? W jakim celu się je stosuje? 66. Czym są rozmyte funkcje bazowe? W jakim celu się je stosuje? 67. Napisz wszystko, co wiesz o bazach Popleowskich. 68. Napisz wszystko, co wiesz o bazach spójnych ze względu na korelację (korelacyjno-konsystentnych). 69. W jaki sposób radzimy sobie z faktem, że w praktyce zmuszeni jesteśmy korzystać z baz niezupełnych? 70. Opisz zjawisko błędu superpozycji bazy (BSSE). Jak możemy radzić sobie z tym problemem? 71. Czym są atomowe orbitale numeryczne (NAO)? Jakie są zalety i wady związane z wykorzystywaniem ich w roli bazy funkcyjnej? 72. Napisz wszystko, co wiesz o bazie nieortogonalnych, uogólnionych funkcji Wanniera (NGWF). 73. Na czym polega optymalizacja bazy in situ? Jakie są zalety i wady takiej optymalizacji? 74. Wyjaśnij krótko na czym polega efekt pudełka na jajka (eggbox effect). 75. Omów zalety i wady bazy fal płaskich w porównaniu z bazami określonymi w przestrzeni rzeczywistej. 76. Wyjaśnij na czym polega baza fal płaskich i kiedy można ją stosować. 77. Czym jest energia kinetyczna odcięcia w bazie fal płaskich? W jakim celu się ją przyjmuje? 78. Wyjaśnij pokrótce na czym polega podejście LMTO. Jakie trudności wiążą się z jego stosowaniem? 79. Podaj przykłady programów umożliwiających obliczenia DFT w bazach (a) fal płaskich, (b) GTO, (c) NAO. 80. Krótko streść swoją wiedzę w temacie metod uwzględniających korelację elektronową (post-HF). 81. Kiedy mówimy o oddziaływaniu, że jest krótkozasięgowe, a kiedy, że jest dalekozasięgowe? Podaj po dwa przykłady dla każdej z kategorii. 82. Kiedy korzystamy z metody Ewalda? Co pozwala ona osiągnąć? Przedstaw krótko zasadę jej działania. Użyj diagramów w wyjaśnieniach. 83. Opisz metodę Ewalda w najbardziej szczegółowy sposób, w jaki potrafisz. 84. Co osiągamy korzystając z metod niejawnego rozpuszczalnika ("implicit solvent")? Jaka jest ogólna zasada ich działania? 85. Porównaj metody jawnego i niejawnego rozpuszczalnika. Jakie są zalety i wady każdego z podejść? 86. Jakie są główne przyczynki do energii (rodzaje oddziaływań) w procesie solwatacji? Opisz każdy z nich. 87. W jaki sposób wyznacza się polarne i apolarne przyczynki do energii swobodnej solwatacji? 88. Czym jest wnęka solutu? Jakie są główne sposoby konstruowania takiej wnęki? Jakie są zalety i wady każdego z tych sposobów? 89. Opisz pokrótce metody niejawnego rozpuszczalnika w kontekście klasycznych symulacji MD. 90. Porównaj model Polarizable Continumm Model (PCM) i model Fatteberta-Gygiego. 91. Jakie są główne trudności związane ze stosowaniem modelu Fatteberta-Gygiego? 92. Wyjaśniej naturę oddziaływań dyspersyjnych. W jakich skalach odległościowych mamy do czynienia z dyspersją? Dlaczego nieskorygowane DFT ma trudności z opisaniem dyspersji? 93. Podaj typowe przykłady układów, w których istotne są oddziaływania dyspersyjne. Dlaczego nieskorygowane DFT ma trudności z opisaniem dyspersji? 94. Opisz pokrótce cztery klasy podejść, które stosuje się aby skorygować obliczenia DFT pod kątem oddziaływań dyspersyjnych. 95. Czym jest DFT-D (znane również jako DFT+D)? W jaki sposób metoda ta uwzględnia oddziaływania dyspersyjne? Jakie są zalety i wady tego podejścia? 96. Czym są van-der-Waalsowskiego funkcjonały gęstości (vdW-DF)? Podaj przykłady. W jaki sposób uwzględniają one oddziaływania dyspersyjne? Jakie są ich zalety i wady? 97. Kiedy przydatne są obliczenia sił w DFT? Jakie trudności są związane z ich wyznaczaniem? 98. Wyprowadź wyrażenie na siłę Hellmanna-Feynmana w DFT. Jakie założenie musimy poczynić w tym wyprowadzeniu? 99. Czym są siły Pulaya? Kiedy są one istotne, a kiedy znikają (zerują się)?
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.