

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Metody obliczeniowe w nanotechnologii , PG_00070924						
Kierunek studiów	Nanotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027		
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	1		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	0.0	30.0	0.0	0.0	60
	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	60		2.0		63.0	125
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z metodami kwantowo-mechanicznymi szeroko wykorzystywanymi w analizie układów w nanoskali na drodze obliczeniowej i symulacyjnej. 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 <i>ab initio</i> -- teorii funkcjonału gęstości (DFT).						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W02] posiada pogłębioną, podbudowaną teoretycznie, szczegółową wiedzę w zakresie zjawisk, metod i teorii odnoszących się do nanotechnologii oraz związanych z nią pokrewnych dziedzin nauki lub techniki	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_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur	Rozumie teoretyczną podbudowę i aparat matematyczny wykorzystywany w modelowaniu nanostruktur metodami kwantowymi i klasycznymi.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_U05] potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie z nanotechnologii oraz pokrewnych nauk ścisłych i przyrodniczych	Jest w stanie samodzielnie rozplanować i przeprowadzić nieskomplikowane obliczenia w dziedzinie struktury elektronowej -- zarówno rozwiązać na drodze teorii proste, modelowe zagadnienia, jak i bardziej skomplikowane -- na drodze symulacji komputerowej. Jest w stanie krytycznie ocenić otrzymane wyniki i wyciągnąć wnioski z otrzymanych wartości.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład 1. Wprowadzenie: Dlaczego nanotechnologia? Mechanizmy odpowiedzialne za unikatowość układów w skali nano. Przykłady zastosowań i obietnic nanotechnologii. Trudności eksperymentalne w nanotechnologii. 2. Postawienie zagadnienia: Oddziaływania w materii. Pytania i odpowiedzi w teoretycznych badaniach nanostruktur. Równanie dynamiczne. Krajobraz metod obliczeniowych w fizyce. 3. Przypomnienie podstaw mechaniki kwantowej: funkcja falowa, interpretacja statystyczna, równanie Schrodingera, operatory, wartość oczekiwana. 4. Pierwsze kroki: Układy wielu ciał. Chemia molekularna. Jednostki atomowe. Hamiltonian molekularny. Przybliżenie Borna-Oppenheimera. Powierzchnia energii potencjalnej. Spin. Hamiltonian elektronowy. Potencjał zewnętrzny. 5. Podejście bezorbitalowe: Gęstość elektronowa. Twierdzenia Hohenberga-Kohna. Bezorbitalowa (czysta) teoria funkcjonału gęstości (OF-DFT). Metoda mnożników Lagrange'a. Wymiana. Korelacja. Model Thomasa-Fermiego i Thomasa-Fermiego-Diraca. 6. DFT w ujęciu Kohna-Shama (KS-DFT): Elektrony oddziałujące vs. nieoddziałujące. Elektrony Kohna-Shama. Orbital molekularny. Iloczyn Hartreego. Wyznacznik Slatera. Potencjał efektywny. Energia korelacyjno-wymienna. Trudności KS-DFT. Diagonalizacja. Samouzgodnienie. Minimalizacja energii w KS-DFT. 7. Aspekty praktyczne: Korelacja i wymiana. LDA, GGA, m-GGA, funkcjonały hybrydowe. Pseudopotencjał. 8. Bazy w DFT: Baza funkcyjna. LCAO. Bazy Slatera i Gaussa. Całki elektronowe. Kontrakcje. Baza minimalna, poszerzona, z rozszczepieniem, funkcje polaryzacyjne, funkcje rozmyte. Baza Pople'owska, baza Dunninga. Granica bazy zupełnej. Błąd superpozycji bazy. Inne bazy: NAO, falki Daubechies, NGWF, fale płaskie, LMTO. 9. Metody post-HF (pokrótce). Treści przedmiotu - laboratoria Atomowy układ jednostek. Fale de Broglie'a. Zależne i niezależne od czasu równanie Schrodingera. Wartości oczekiwane. Minimalizacja funkcji z więzami, mnożniki Lagrange'a. Zasada wariacyjna dla funkcji falowej. Elektrostatyka ładunków punktowych i rozciągłych gęstości ładunku. Model Thomasa-Fermiego. Poprawka Diraca. Zasada wariacyjna dla gęstości elektronowej. Baza minimalna. Orbitale Slatera i Gaussa. Baza fal płaskich. Całki nakładania. Całki jednoelektronowe. Błąd superpozycji bazy. Dodatkowe: Metody numeryczne, metody wariacyjne, fizyka statystyczna.		
Wymagania wstępne i dodatkowe	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 Schrodingera, obserwabla, 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 osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	Egzamin pisemny	50.0%	50.0%
	Sprawozdania z ćwiczeń laboratoryjnych	50.0%	50.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. David J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, 2nd ed, Pearson Prentice Hall, 2004. 2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2007. 3. R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Springer, 2013. 4. N. M. Harrison, An Introduction to Density Functional Theory, Imperial College, London, 2025.
	Uzupełniająca lista lektur	1. Tadmor, Miller, Modeling Materials, Cambridge, 2011.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. Jakie są główne różnice między klasycznymi a kwantowymi metodami obliczeniowego badania układów w skali nano? 2. 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? 3. Wyprowadź pokrótce pierwsze twierdzenie Hohenberga-Kohna. 4. 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? 5. Wymień i krótko opisz główne trudności DFT w ujęciu Kohna i Shama. 6. Omów pokrótce znane Ci szczyble drabiny Jakubowej funkcjonałów korelacyjno-wymiennych. Co znajduje się na obydwu końcach drabiny? 7. Co to znaczy, że pseudopotencjał jest nielokalny? Semilokalny? Lokalny? 8. Porównaj orbitale Slatera i orbitale Gaussa. Wzory, zalety, wady. Opisz użyte symbole. 9. Napisz wszystko, co wiesz o bazach Popleowskich. 10. Wyjaśnij na czym polega baza fal płaskich i kiedy można ją stosować.	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.