



Karta przedmiotu

|                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |
|------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|--------------------------------------|------------------------|------------|-----------------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu                   | Kwantowe modelowanie materiałów elektronicznych, PG_00070894                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |
| Kierunek studiów                         | Informatyka                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |
| Data rozpoczęcia studiów                 | luty 2025 r.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                           | Rok akademicki realizacji przedmiotu |                        | 2025/2026  |                       |       |
| Poziom kształcenia                       | II stopnia                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                           | Grupa zajęć                          |                        |            |                       |       |
| Forma studiów                            | stacjonarne                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                           | Sposób realizacji                    |                        | na uczelni |                       |       |
| Rok studiów                              | 2                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                           | Język wykładowy                      |                        | polski     |                       |       |
| Semestr studiów                          | 3                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                           | Liczba punktów ECTS                  |                        | 3.0        |                       |       |
| Profil kształcenia                       | ogólnoakademicki                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                           | Forma zaliczenia                     |                        | zaliczenie |                       |       |
| Jednostka prowadząca                     | Wydział Politechniki Gdańskiej -> Wydział Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki -> Katedra Optoelektroniki                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |
| Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców) | Odpowiedzialny za przedmiot                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                           | dr inż. Bartłomiej Dec               |                        |            |                       |       |
|                                          | Prowadzący zajęcia z przedmiotu                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                           | dr inż. Bartłomiej Dec               |                        |            |                       |       |
| 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |
|                                          | Adres kursu na platformie eNauczanie: <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=4697">https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=4697</a>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |
|                                          | Moodle ID: 4697 Kwantowe modelowanie materiałów elektronicznych<br><a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=4697">https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=4697</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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 45                                                        |                                      | 3.0                    |            | 27.0                  | 75    |
| Cel przedmiotu                           | Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z nowoczesnymi metodami kwantowego modelowania materiałów elektronicznych, ze szczególnym uwzględnieniem praktycznego wykorzystania oprogramowania symulacyjnego (np. QuantumATK). Student nabędzie umiejętności planowania i przeprowadzania symulacji kwantowych materiałów stosowanych w elektronice, analizy wyników oraz interpretacji właściwości elektronicznych, optycznych i transportowych materiałów w kontekście szeroko rozumianych zastosowań technologicznych od półprzewodników do zaawansowanych materiałów funkcjonalnych. |                                                           |                                      |                        |            |                       |       |

|                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                          |
|-------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Efekty uczenia się przedmiotu                                     | Efekt kierunkowy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Efekt z przedmiotu                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Sposób weryfikacji i oceny efektu                                                                                                        |
|                                                                   | [K7_U04] potrafi wykorzystywać posiadaną wiedzę z zakresu metod i technik programowania oraz dobrać i zastosować właściwe metody i narzędzia programistyczne w tworzeniu oprogramowania komputerów albo programowania urządzeń lub sterowników wykorzystujących mikroprocesory albo elementy lub układy programowalne, charakterystycznych dla danego kierunku studiów, dokonując oceny i krytycznej analizy wykonanego oprogramowania, a także syntezy i twórczej interpretacji prezentowanych za jego pomocą informacji                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Student potrafi projektować i przeprowadzać obliczenia kwantowe z wykorzystaniem języka Python oraz dedykowanego oprogramowania symulacyjnego, dobierając i stosując właściwe metody i narzędzia programistyczne (siatka k-punktów, energia odcięcia, funkcjonały wymiany-korelacji) w zależności od rodzaju badanego materiału. Potrafi dokonać oceny i krytycznej analizy napisanych skryptów obliczeniowych oraz twórczo interpretować wyniki symulacji DFT (struktury pasmowe, gęstość stanów, właściwości transportowe) w kontekście zastosowań w elektronice.                                  | [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi<br>[SU1] Ocena realizacji zadania<br>[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji |
|                                                                   | [K7_W02] zna i rozumie w pogłębionym stopniu wybrane prawa i zjawiska fizyczne oraz metody i teorie wyjaśniające złożone zależności między nimi, stanowiące zaawansowaną wiedzę ogólną z dziedziny nauk technicznych, związaną z kierunkiem studiów                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Student zna i rozumie zaawansowane koncepcje teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz metod kwantowego modelowania struktury elektronowej materiałów elektronicznych. Posiada wiedzę na temat przybliżeń używanych w obliczeniach ab initio, metod reprezentacji funkcji falowych (LCAO, plane waves) oraz podstaw teoretycznych komputerowych symulacji materiałów stosowanych w elektronice. Zna zasady modelowania właściwości elektronicznych, optycznych i transportowych materiałów – od półprzewodników do zaawansowanych materiałów funkcjonalnych – z wykorzystaniem narzędzi obliczeniowych. | [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej                                                                                                       |
| Treści przedmiotu                                                 | Treści przedmiotu - wykład<br>Wprowadzenie do kwantowych metod modelowania materiałów elektronicznych. Teoria funkcjonału gęstości (DFT) i jej zastosowanie w obliczeniach struktur elektronicznych. Przybliżenia i metody aproksymacji w obliczeniach kwantowych. Modelowanie właściwości elektronicznych, optycznych i magnetycznych materiałów. Zastosowanie metod kwantowych w projektowaniu urządzeń nanoelektronicznych i spintronicznych.<br><br>Treści przedmiotu - laboratoria<br>Praktyczne wykorzystanie oprogramowania do modelowania struktur atomowych i właściwości elektronicznych materiałów. Budowanie modeli atomowych, konfiguracja parametrów obliczeń DFT, przeprowadzanie symulacji i analiza wyników. Wizualizacja struktur elektronowych, obliczenie struktur pasmowych, gęstości stanów elektronowych i właściwości transportowych. Modelowanie interfejsów i nanostruktur. |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                          |
| Wymagania wstępne i dodatkowe                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                          |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się     | Sposób oceniania (składowe)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Próg zaliczeniowy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Składowa oceny końcowej                                                                                                                  |
|                                                                   | Wykład - kolokwium                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 50.0%                                                                                                                                    |
|                                                                   | Laboratorium - sprawozdania                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 50.0%                                                                                                                                    |
| Zalecana lista lektur                                             | Podstawowa lista lektur                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 1. Newman, M. "Computational Physics", wyd. 2, CreateSpace/ University of Michigan (2013)<br>2. Martin, R.M. "Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods", Cambridge University Press (2020)<br>3. QuantumATK User Manual and Tutorials, Synopsys Documentation<br>4. Kohanoff, J. "Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods", Cambridge University Press (2006)<br>5. Frenkel, D., Smit, B. "Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications", wyd. 3, Academic Press/Elsevier (2023)                         |                                                                                                                                          |
|                                                                   | Uzupełniająca lista lektur                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | nie dotyczy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                                                                                                                                          |
|                                                                   | Adresy eZasobów                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                          |
| Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                          |
| Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu                            | Nie dotyczy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                          |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.