

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Metody teoretyczne projektowania materiałów, PG_00071147						
Kierunek studiów	Fizyka Techniczna, Matematyka, Nanotechnologia, Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	2		Język wykładowy		polski		
Semestr studiów	4		Liczba punktów ECTS		1.0		
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	15.0	0.0	0.0	0.0	0.0	15
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Adres kursu na platformie eNauczanie: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=3646						
	Moodle ID: 3646 Metody teoretyczne projektowania materiałów 2026 https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=3646						
	Dodatkowe informacje:						
	Wykład. Stacjonarnie. Jeśli zajdzie potrzeba -- zajęcia 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	15		2.0		8.0	25
Cel przedmiotu	Przedstawienie różnorodności i często niezastępowalności metod teoretycznych przy projektowaniu nowych materiałów funkcjonalnych. Przedstawienie licznych przykładów zastosowania do projektowania materiałów polimerowych, elektrochemicznych, opartych o ciecze, gazy i ciało stałe, również w kontekście realizowanych projektów europejskich (z udziałem przedsiębiorców przemysłowych). Przedstawienie ogólnych zasad fizycznych i matematycznych stosowanych metod obliczeniowych: klasycznych, kwantowych, hybrydowych. Ogólne różnice pomiędzy metodami, bardziej szczególne algorytmy i problemy obliczeniowe w różnych metodach. Główne zasady stosowalności danych klas metod w ogólnych rodzajach przypadków, z przykładami. Oprogramowanie. W miarę możliwości przedstawienie „na żywo prowadzenia obliczeń, wyników, analizy wyników.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_K101] uznaje znaczenie wiedzy związanej ze studiowanym kierunkiem w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych, krytycznie oceniając pozyskiwane informacje		Student orientuje się w dostępnych metodach obliczeniowych i potrafi wybrać odpowiednie z nich w celu badania danych procesów w przypadku układów o określonej złożoności.	[SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce
	[K7_W101] identyfikuje w pogłębionym stopniu kluczowe obiekty i zjawiska związane ze studiowanym kierunkiem oraz opisujące je teorie i możliwe do zastosowania metody analityczne i projektowe		Student potrafi zdefiniować modele teoretyczne, nad którymi w następnym kroku pracuje stosując metody teoretyczne i uzyskuje systematyczny i porównywalny zbiór danych analitycznych.	[SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_U101] formułuje złożone problemy badawcze i dobiera właściwe metody uzyskując innowacyjne rozwiązania, współpracując z innymi osobami, zarówno w roli lidera jak i członka zespołu		Student potrafi zdefiniować złożone zagadnienie badawcze, np. z elektrochemii, w kontekście uzyskania lepszego materiału, np. lepszego ogniwa elektrochemicznego, poprzez znalezienie czynników wpływających bezpośrednio na wydajność ogniwa i następnie na szukaniu lepszego struktury materiału w celu poprawienia właściwości tego ogniwa.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład 1. Organizacja, omówienie przedmiotu i zagadnień, zasady zaliczeń. Literatura. Propozycje realizacji własnych zagadnień z zastosowaniem metod teoretycznych, również na poziomie prac magisterskich. Przedstawienie złożoności zagadnień teoretycznych. 2. Przykład pierwszy zastosowania metod teoretycznych: reakcje chemiczne, polimery wytwarzane w technologii CVD, funkcjonalizacja polimerów w trakcie CVD, zastosowanie w ciekłych soczewkach. 3. Przykład drugi zastosowania metod teoretycznych: różnorodność struktur przestrzennych i struktury elektronowej w przypadku tlenków metali od molekuł stechiometrycznie najprostszych do molekuł nanometrycznych. Odniesienie do ferrofluidów opartych o ciecze jonowe, stosowanych w układach termoelektrycznych. 4. Metody klasyczne pola siłowego: składowe energii, parametryzacja pól siłowych, coarse graining, zalety i ograniczenia. 5-6. Metody kwantowe: aksjomaty mechaniki kwantowej (funkcja falowa, operatory, równanie Schrödingera, spin). 7. Metody kwantowe: od modelu rotatora sztywnego do harmonik sferycznych. 8. Metody kwantowe: od modelu atomu wodoru do orbitali atomowych. 9-10. Metody kwantowe: metody wariacyjne liniowe i nieliniowe (w tym metoda HFR), algorytm SCF. 11. Układ 3-elektronów: pełne obliczenie do uzyskania wyrażenia na energię dowolnej konfiguracji elektronowej. 12. Cząsteczka wodoru: konfiguracje, spin i pełne wyprowadzenia na energie dla wszystkich konfiguracji. 13. Metody wielokonfiguracyjne: złożoność, różnorodność metod, jakość, przykłady. 14. Metody perturbacyjne: wyprowadzenie wzorów, poprawki. 15. Wybrane układy: obliczenia, orbitale molekularne, właściwości molekuł, praktyczne wskazówki.			
Wymagania wstępne i dodatkowe	Podstawy chemii, fizyki i matematyki.			
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy		Składowa oceny końcowej
	zaliczenie na koniec zajęć.	51.0%		100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Lucjan Piel, Idee Chemii Kwantowej, Warszawa, wydanie 2, 2011, PWN, 2. Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 3rd Edition ISBN: 978-1-118-82599-0		
	Uzupełniająca lista lektur	1. Włodzimierz Kołos, Chemia Kwantowa, PWN, Warszawa, 1978. 2. materiały prowadzącego: wyprowadzenia, wykłady, przykładowe dane wejściowe i wyjściowe w formacie pdf.		
	Adresy eZasobów			

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	Jak wygląda profil reakcji chemicznej bez zmiany spinu i ze zmianą spinu w czasie procesu? Znormalizuj zadaną wzorem funkcję falową. Napisz konfiguracje elektronowe zadanych rodników/jonów danych atomów. Napisz wyznacznik Slatera dla zadanych konfiguracji cząsteczki wodoru. Narysuj diagram energetyczny zadanej molekuly dwuatomowej. Przedstaw wzór na energię elektronową dla dwóch zadanych konfiguracji elektronowych dwóch izomerów molekuly. Napisz algorytm SCF. Kiedy potrzebne są metody relatywistyczne? Wyłumacz, dlaczego elektrony relatywistyczne wpływają na zachowanie elektronów walencyjnych. Jak można poprawić elastyczność polimeru i jak to zbadać metodami teoretycznymi (klasycznymi i kwantowymi). Jak można znaleźć sposób funkcjonalizacji chemicznej danego układu, w tym jak można znaleźć czynniki strukturalne odpowiedzialne za funkcjonalizację.
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.