



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie zjawisk fizycznych, PG_00031936						
Kierunek studiów	Fizyka Techniczna						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2027/2028		
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	2	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Katedra Fizyki Teoretycznej i Informatyki Kwant.						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Julien Guthmuller				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	30.0	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	25.0		75
Cel przedmiotu	Wprowadzenie studentów w tematykę podstaw metod teoretycznych i obliczeniowych służących do przeprowadzania kwantowych symulacji układów molekularnych. Studenci poznają metody chemii kwantowej i zastosują je do badania cząsteczek dwu- i wieloatomowych. Studenci nauczą się analizować rezultaty obliczeń i oceniać ich dokładność przez porównanie z wynikami doświadczalnymi.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_W04] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych stosowanych przy opisie i modelowaniu zjawisk fizycznych.	Studenci poznają teorie, aproksymacje i algorytmy niezbędne do symulacji zjawisk atomowych i molekularnych.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[K7_U03] potrafi prowadzić zaawansowaną pracę laboratoryjną z zakresu fizyki i nauk pokrewnych, dobierając i przystosowując właściwe metody i narzędzia oraz krytycznie analizując i oceniając istniejące rozwiązania techniczne.	Studenci nauczą się rozwiązywać problemy, pracować w grupach i realizować projekty laboratoryjne.	[SU1] Ocena realizacji zadania
	[K7_U05] potrafi samodzielnie lub w zespole, w tym jako jego lider, planować i przeprowadzać zaawansowane obliczenia teoretyczne, badania eksperymentalne i symulacje komputerowe w celu rozwiązania złożonych i nietypowych problemów naukowych i inżynierskich, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie.	Studenci zapoznają się z wykorzystaniem programów komputerowych do opisu właściwości molekularnych. Studenci nauczą się analizować rezultaty obliczeń i oceniać ich dokładność przez porównanie z wynikami doświadczalnymi.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU1] Ocena realizacji zadania
[K7_U02] potrafi programować w wybranym języku na poziomie zaawansowanym oraz stosować pakiety oprogramowania specjalistycznego.	Studenci nauczą się, jak dobierać odpowiednie parametry fizyczne do obliczeń kwantowych oraz jak przygotowywać pliki wejściowe w odpowiednim formacie. Nauczą się również korzystać z graficznych narzędzi wizualizacyjnych do przygotowywania danych wejściowych i analizy wyników.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi	
Treści przedmiotu	<p>Treści przedmiotu - wykład</p> <ul style="list-style-type: none"> - Przybliżenie Borna-Oppenheimera i definicja powierzchni energii potencjalnej. Obliczenia krzywych energii potencjalnej, momentów dipolowych i długości wiązań cząsteczek dwuatomowych. - Metoda Hartree-Focka i równania Roothaana. Optymalizacja geometrii cząsteczek i orbitali atomowych. Obliczenia energii jonizacji i powinowactwa elektronowego. - Metody wychodzące poza przybliżenie Hartree-Focka. Bazy orbitali atomowych. Dokładne obliczenia energii jonizacji metodą sprzężonych klasterów (CC). Określenie zbieżności bazy orbitali atomowych. - Energie oscylacyjne w przybliżeniu oscylatora harmonicznego. Obliczenia częstotliwości drgań własnych, modów normalnych, widm podczerwieni i widm Ramana cząsteczek wieloatomowych. - Teoria funkcjonałów gęstości i zależna od czasu teoria funkcjonałów gęstości. Obliczenia stanów wzbudzonych, widm absorpcji i fluorescencji. Wpływ rozpuszczalnika. <p>Treści przedmiotu - laboratoria</p> <p>Projekt 1: Optymalizacja geometrii cząsteczek i orbitali atomowych. Obliczenia energii jonizacji i powinowactwa elektronowego.</p> <p>Projekt 2: Obliczenia częstotliwości drgań własnych, modów normalnych, widm podczerwieni i widm Ramana cząsteczek wieloatomowych.</p> <p>Projekt 3: Obliczenia stanów wzbudzonych, widm absorpcji i fluorescencji. Wpływ rozpuszczalnika.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Brak		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Kolokwium zaliczeniowe	50.0%	40.0%
	Zaliczenie laboratorium	50.0%	60.0%

Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	Piela L., Idee chemii kwantowej, PWN 2005 Jensen F., Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd. 2011 Szabo A. and Ostlund N. S., Modern Quantum Chemistry, Dover Publications, Inc. https://orcaforum.cec.mpg.de/
	Uzupełniająca lista lektur	brak
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	brak	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.