

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Kwantowe modelowanie elementów elektronicznych, PG_00069760						
Kierunek studiów	Informatyka, Technologie wodorowe i elektromobilność						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2026 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu		2026/2027			
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć					
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji		na uczelni			
Rok studiów	1	Język wykładowy		polski			
Semestr studiów	2	Liczba punktów ECTS		2.0			
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia		zaliczenie			
Jednostka prowadząca	Wydziały 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	15.0	0.0	15.0	0.0	0.0	30
	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	30		2.0		18.0	50
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z nowoczesnymi metodami kwantowego modelowania materiałów i urządzeń elektronicznych, ze szczególnym uwzględnieniem praktycznego wykorzystania oprogramowania symulacyjnego (np. QuantumATK). Student nabędzie umiejętności planowania i przeprowadzania symulacji kwantowych, analizy wyników oraz interpretacji właściwości elektronicznych materiałów w kontekście zastosowań technologicznych.						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu	
	[K7_U08] potrafi przy identyfikacji i formułowaniu specyfikacji zadań inżynierskich oraz ich rozwiązywaniu: – wykorzystać metody analityczne, symulacyjne i eksperymentalne, – dostrzegać ich aspekty systemowe i pozatechniczne, – dokonać wstępnej oceny ekonomicznej proponowanych rozwiązań i podejmowanych działań inżynierskich		Student potrafi projektować i przeprowadzać obliczenia kwantowe, wybierając odpowiednie parametry obliczeniowe (siatka k-punktów, energia odcięcia, funkcjonały wymiany-korelacji) w zależności od rodzaju badanego materiału. Umie analizować wyniki symulacji DFT (struktury pasmowe, gęstość stanów, właściwości transportowe) oraz interpretować je w kontekście projektowania urządzeń elektronicznych. Potrafi ocenić dokładność i ograniczenia różnych metod obliczeniowych oraz dokonać wstępnej oceny kosztów obliczeniowych proponowanych symulacji.			[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania	
	[K7_W03] zna i rozumie w pogłębionym stopniu budowę i zasady działania komponentów i systemów związanych z kierunkiem studiów, w tym teorie, metody i złożone zależności między nimi oraz wybrane zagadnienia szczegółowe – właściwe dla programu kształcenia		Student zna i rozumie zaawansowane koncepcje teorii funkcjonału gęstości (DFT) oraz metod kwantowego modelowania struktury elektronowej materiałów. Posiada wiedzę na temat przybliżeń używanych w obliczeniach ab initio, metod reprezentacji funkcji falowych (LCAO, plane waves). Zna zasady modelowania właściwości elektronicznych, optycznych i transportowych nanostruktur oraz urządzeń elektronicznych w skali atomowej.			[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej	

Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład Wprowadzenie do kwantowych metod modelowania materiałów i urządzeń 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.		
	Treści przedmiotu - laboratoria 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%	30.0%
	Laboratorium - sprawozdania	50.0%	70.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. Szabo, A., Ostlund, N.S. "Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory", Dover Publications (2012) 2. Martin, R.M. "Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods", Cambridge University Press (2020) 3. QuantumATK User Manual and Tutorials, Synopsys Documentation 4. Kohanoff, J. "Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods", Cambridge University Press (2006) 5. Marder, M.P. "Condensed Matter Physics", Wiley (2010)	
	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.