

KARTA PRZEDMIOTU

Nazwa przedmiotu: **Aktualne problemy badawcze (SDR-2-NF-APB)**

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim:

Dane dotyczące przedmiotu:

Przedmiot dla jednostki:

Szkoła Doktorska UKW

Cykl dydaktyczny:

Rok akademicki 2024/25

Koordynator przedmiotu cyklu:

dr hab. Angelika Baranowska-Łączkowska prof. uczelni

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Egzamin

Język wykładowy:

polski

Dane dotyczące przedmiotu cyklu:

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu cyklu:

Egzamin

Dyscyplina

nauki fizyczne

Efekty kształcenia modułu zajęć

W01 - zna i rozumie podstawy teoretyczne wybranych metod obliczeniowych stosowanych w badaniu struktury i właściwości układów wieloelektronowych (SD-W1)

W02 - zna i rozumie główne tendencje rozwojowe metod obliczeniowych stosowanych w naukach fizycznych (SD-W2)

U01 - potrafi dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań naukowych prowadzonych metodami obliczeniowymi oraz ich wkładu w rozwój wiedzy (SD-U2)

K01 - jest gotów do uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych (SD-K3)

Przedmioty wprowadzające i wymagania wstępne

Fizyka kwantowa

Szczegóły zajęć i grup

Wykład (15 godzin)

Literatura:

1. R. F. Nalewajski, „Podstawy i metody chemii kwantowej: wykłady”, PWN, Warszawa 2001.

2. H. Haken, H.Ch. Wolf, „Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej”, PWN, Warszawa 1998.

3. L. Piela, „Idee chemii kwantowej”, PWN, Warszawa 2023.

4. F. Jensen, „Introduction to computational chemistry”, Wiley, New York 2007.

5. R. G. Parr, Y. Weitao, "Density-Functional Theory of atoms and molecules", Oxford University Press, 1994.

Efekty uczenia się:

W01 - zna i rozumie podstawy teoretyczne wybranych metod obliczeniowych stosowanych w badaniu struktury i właściwości układów wieloelektronowych (SD-W1)

W02 - zna i rozumie główne tendencje rozwojowe metod obliczeniowych stosowanych w naukach fizycznych (SD-W2)

U01 - potrafi dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań naukowych prowadzonych metodami obliczeniowymi oraz ich wkładu w rozwój wiedzy (SD-U2)

K01 - jest gotów do uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych (SD-K3)

Metody i kryteria oceniania:

Egzamin ustny obejmujący zagadnienia omawiane na wykładzie.

Ocena bardzo dobra: doktorant posiada dogłębną wiedzę z zakresu zagadnień omawianych na wykładzie; potrafi dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań naukowych prowadzonych różnorodnymi metodami obliczeniowymi oraz ich wkładu w rozwój wiedzy, biegle stosując fachową termi-no-logię.

Ocena dobra: doktorant posiada dużą wiedzę z zakresu zagadnień omawianych na wykładzie; potrafi dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań naukowych prowadzonych różnorodnymi metodami obliczeniowymi oraz ich wkładu w rozwój wiedzy, swobodnie stosując fachową termi-no-logię.

Ocena dostateczna: doktorant posiada podstawową wiedzę z zakresu zagadnień omawianych na wykładzie; potrafi dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań naukowych prowadzonych podstawowymi metodami obliczeniowymi oraz ich wkładu w rozwój wiedzy, poprawnie stosując fachową termi-no-logię.

Ocena niedostateczna: doktorant nie osiągnął opisanych standardów.

Zakres tematów zajęć:

1. Metoda Hartree-Focka.

2. Korelacja elektronowa.

3. Metoda oddziaływania konfiguracji.

4. Rachunek zaburzeń Mollera-Plesseta.

5. Teoria sprzężonych klastrów.

6. Teoria funkcjonału gęstości.

7. Bazy funkcyjne stosowane w obliczeniach kwantowo-mechanicznych.

8. Przykłady zastosowań metod obliczeniowych.

9. Ograniczenia poznanych metod.

10. Perspektywy rozwoju.