

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Mechanika kwantowa dla bioinformatyków, PG_00148513						
Kierunek studiów	Bioinformatyka (O)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2024 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	I stopnia - licencjackie	Grupa zajęć			Grupa zajęć fakultatywnych		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	5	Liczba punktów ECTS			3.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Rektor -> Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki -> Instytut Fizyki Teoretycznej i Astrofizyki						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		prof. dr hab. Marcin Wieśniak				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	30.0	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		0.0		0.0	30
Cel przedmiotu	<ol style="list-style-type: none"> Zaznajomienie studentów z podstawami mechaniki kwantowej Zapoznanie studentów z elementami teorii informacji kwantowej Zapoznanie studentów z teoretycznym opisem oddziaływań międzycząsteczkowych Zapoznanie studentów z teorią funkcjonału gęstości 						
Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy		Efekt z przedmiotu			Sposób weryfikacji i oceny efektu	
	[BIOINL3_W02] Ma wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych		Student zna: Aksjomaty mechaniki kwantowej Podstawowe pojęcia stojące z teorią informacji kwantowej Formalizm matematyczny metod wariacyjnych oraz zaburzeniowych stosowanych do rozwiązywania równania Schroedingera Znaczenie efektów relatywistycznych w przypadku ciężkich atomów i kompleksów je zawierających			[SW3] opracowanie tekstowe/praca pisemna	
	[BIOINL3_U02] Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką		Umie rozwiązać analitycznie równanie Schroedingera dla atomu wodoropodobnego Umie zdefiniować klasy problemów w których komputer kwantowy ma przewagę nad klasycznym Umie zdefiniować najważniejsze oddziaływania które należy uwzględnić, aby dokonać obliczeń struktury elektronowej dla układów molekularnych.			[SU3] opracowanie tekstowe/praca pisemna [SU6] demonstracja umiejętności praktycznych	

Treści przedmiotu	<p>Aksjomaty mechaniki kwantowej na przykładzie spinu-1/2. (4 godziny)</p> <p>2. Informacyjne konsekwencje kubitów (kwantowej superpozycji).</p> <p>Problem Deutscha-Jozsy, obliczenia kwantowe (równoległość), kwantowa kryptografia.</p> <p>(2 godziny)</p> <p>3. Wiele kubitów. Splątanie i rozproszone obliczenia. (2 godziny)</p> <p>4. Zasada nieoznaczoności. (2 godziny)</p> <p>5. Atom wodoropodobny. Kwantowanie energii, momentu pędu, orbitale. (4 godziny)</p> <p>6. Własności pierwiastków w świetle mechaniki kwantowej. Omówienie układu okresowego z poruszeniem znaczenia efekty relatywistycznych.</p> <p>(2 godziny)</p> <p>7. Oddziaływania międzycząsteczkowe oraz wiązania chemiczne w opisie mechaniki kwantowej (4 godziny)</p> <p>8. Przybliżone metody rozwiązywania równia Schroedingera:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Równania Hartree-Focka (metoda pola samouzgodnionego) - Znaczenie korelacji elektronowej zilustrowane na przykładzie Metody oddziaływania konfiguracji. - Metody zaburzeniowe w rozwiązywaniu równania Schroedingera - Elementy teorii funkcjonału gęstości <p>(łącznie 10 godzin)</p>											
Wymagania wstępne i dodatkowe	n											
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<table border="1" data-bbox="448 1447 1487 1541"> <thead> <tr> <th data-bbox="448 1447 794 1480">Sposób oceniania (składowe)</th> <th data-bbox="794 1447 1141 1480">Próg zaliczeniowy</th> <th data-bbox="1141 1447 1487 1480">Składowa oceny końcowej</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="448 1480 794 1514">dwa kolokwia</td> <td data-bbox="794 1480 1141 1514">51.0%</td> <td data-bbox="1141 1480 1487 1514">100.0%</td> </tr> </tbody> </table>			Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej	dwa kolokwia	51.0%	100.0%			
Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej										
dwa kolokwia	51.0%	100.0%										
Zalecana lista lektur	<table border="1" data-bbox="448 1547 1487 2031"> <tr> <td data-bbox="448 1547 794 1957">Podstawowa lista lektur</td> <td colspan="2" data-bbox="794 1547 1487 1957"> <p>A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):</p> <p>A.1. wykorzystywana podczas zajęć</p> <ul style="list-style-type: none"> • Berhold-Georg Englert: Lectures on Quantum Mechanics, World Scientific, 2006 <p>B. Literatura uzupełniająca</p> <ul style="list-style-type: none"> • W. Koch, M.C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley, 2001. • Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2006 </td> </tr> <tr> <td data-bbox="448 1957 794 1995">Uzupełniająca lista lektur</td> <td colspan="2" data-bbox="794 1957 1487 1995">n</td> </tr> <tr> <td data-bbox="448 1995 794 2031">Adresy eZasobów</td> <td colspan="2" data-bbox="794 1995 1487 2031">Adresy na platformie eNauczanie:</td> </tr> </table>			Podstawowa lista lektur	<p>A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):</p> <p>A.1. wykorzystywana podczas zajęć</p> <ul style="list-style-type: none"> • Berhold-Georg Englert: Lectures on Quantum Mechanics, World Scientific, 2006 <p>B. Literatura uzupełniająca</p> <ul style="list-style-type: none"> • W. Koch, M.C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley, 2001. • Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2006 		Uzupełniająca lista lektur	n		Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:	
Podstawowa lista lektur	<p>A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):</p> <p>A.1. wykorzystywana podczas zajęć</p> <ul style="list-style-type: none"> • Berhold-Georg Englert: Lectures on Quantum Mechanics, World Scientific, 2006 <p>B. Literatura uzupełniająca</p> <ul style="list-style-type: none"> • W. Koch, M.C. Holthausen, A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley, 2001. • Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 2006 											
Uzupełniająca lista lektur	n											
Adresy eZasobów	Adresy na platformie eNauczanie:											

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	n
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.