


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu		Kod ECTS			
Mechanika kwantowa dla bioinformatyków		13.2.0409			
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot					
Instytut Fizyki Teoretycznej i Astrofizyki					
Studia					
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia		
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	forma	stacjonarne		
		moduł	Podstawowa		
		specjalnościowy	Podstawowa		
		specjalizacja	Podstawowa		
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)					
dr hab. Marek Krośnicki; prof. dr hab. Wiesław Laskowski; prof. dr hab. Tomasz Paterek					
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin				Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć				3	
Ćw. laboratoryjne					
Sposób realizacji zajęć					
zajęcia w sali dydaktycznej					
Liczba godzin					
Ćw. laboratoryjne: 30 godz.					
Termin realizacji przedmiotu					
2022/2023 zimowy					
Status przedmiotu			Język wykładowy		
fakultatywny (do wyboru)			polski		
Metody dydaktyczne			Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne		
<ul style="list-style-type: none"> •ćwiczenia laboratoryjne: •praca własna 			Sposób zaliczenia		
			Zaliczenie na ocenę		
			Formy zaliczenia		
			- kolokwium - 2 kolokwia z zadaniami teoretycznymi oraz obliczeniowymi rozwiązywanymi w języku python.		
			Podstawowe kryteria oceny		
			Ćwiczenia laboratoryjne: O zaliczeniu ćwiczeń decydują wyniki dwóch kolokwiów. Aby uzyskać zaliczenie z ćwiczeń należy otrzymać ponad połowę możliwych do zdobycia punktów z każdego z nich.		
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się					
zakładany efekt kształcenia	konwersatorium	kolokwium	sprawozdanie	egzamin pisemny	egzamin ustny
	Wiedza				
KW_01		x			
	Umiejętności				
KU_01		x			
	Kompetencje				
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi					

A. Wymagania formalne brak	
B. Wymagania wstępne brak	
Cele kształcenia <ol style="list-style-type: none"> 1. Zaznajomienie studentów z podstawami mechaniki kwantowej 2. Zapoznanie studentów z elementami teorii informacji kwantowej 3. Zapoznanie studentów z teoretycznym opisem oddziaływań międzycząsteczkowych 4. Zapoznanie studentów z teorią funkcjonału gęstości 	
Treści programowe <ol style="list-style-type: none"> 1. Aksjomaty mechaniki kwantowej na przykładzie spinu-1/2. (4 godziny) 2. Informacyjne konsekwencje kubitów (kwantowej superpozycji). Problem Deutsch-Jozsa, obliczenia kwantowe (równoległość), kwantowa kryptografia. (2 godziny) 3. Wiele kubitów. Splątanie i rozproszone obliczenia. (2 godziny) 4. Zasada nieoznaczoności. (2 godziny) 5. Atom wodoropodobny. Kwantowanie energii, momentu pędu, orbitale. (4 godziny) 6. Własności pierwiastków w świetle mechaniki kwantowej. Omówienie układu okresowego z poruszeniem znaczenia efekty relatywistycznych. (2 godziny) 7. Oddziaływania międzycząsteczkowe oraz wiązania chemiczne w opisie mechaniki kwantowej (4 godziny) 8. Przybliżone metody rozwiązywania równia Schroedingera: <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 (łącznie 10 godzin) 	
Wykaz literatury <ol style="list-style-type: none"> A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu): <ol style="list-style-type: none"> A.1. wykorzystywana podczas zajęć <ul style="list-style-type: none"> • Berhold-Georg Englert: Lectures on Quantum Mechanics, World Scientific, 2006 B. Literatura uzupełniająca <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 	
Kierunkowe efekty uczenia się KW_02 Ma wiedzę z nauk ścisłych i przyrodniczych niezbędną do zrozumienia podstaw funkcjonowania organizmów żywych KU_02 Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką	Wiedza Student zna: <ol style="list-style-type: none"> 1. Aksjomaty mechaniki kwantowej 2. Podstawowe pojęcia stojące z teorią informacji kwantowej 3. Formalizm matematyczny metod wariacyjnych oraz zaburzeniowych stosowanych do rozwiązywania równania Schroedingera 4. Znaczenie efektów relatywistycznych w przypadku ciężkich atomów i kompleksów je zawierających
	Umiejętności <ol style="list-style-type: none"> 1. Umie rozwiązać analitycznie równanie Schroedingera dla atomu wodoropodobnego 2. Umie zdefiniować klasy problemów w których komputer kwantowy ma przewagę nad klasycznym 3. Umie zdefiniować najważniejsze oddziaływania które należy uwzględnić, aby dokonać obliczeń struktury elektronowej dla układów molekularnych.
	Kompetencje społeczne (postawy)
Kontakt marek.krosnicki@ug.edu.pl	