

NAZIV PREDMETA		Računarske metode i njihova primjena u nano- i biofizici				
Kod	PMP409	Godina studija	DS-2			
Nositelj/i predmeta	prof.dr. sc. Vlasta Bonačić Koutecky	Bodovna vrijednost (ECTS)	5,0			
Suradnici	prof.dr. sc. Vlasta Bonačić Koutecky	Način izvođenja nastave (broj sati u semestru)	P	S	V	T
			30	15		
Status predmeta	izborni	Postotak primjene e-učenja				
OPIS PREDMETA						
Ciljevi predmeta	Sposobnost modeliranja nanostrukture i njihovih svojstava za interpretaciju eksperimentalnih rezultata i stimuliranja novih eksperimenata					
Uvjeti za upis predmeta i ulazne kompetencije potrebne za predmet	Znanje klasične i osnove kvantne fizike					
Očekivani ishodi učenja na razini predmeta (4-10 ishoda učenja)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Odabir prikladnih metoda za simuliranje svojstava sistema unutar nano- i biofizike 2. Samostalno vrednovanje i interpretacija rezultata dobivenih simulacijama 3. Usporedba s eksperimentalnim rezultatima 4. Vještina usporedbe s dostignućima u literaturi 					
Sadržaj predmeta detaljno razrađen prema satnici nastave	<ol style="list-style-type: none"> 1. Osnovne teorijske metode za određivanje struktura i optičkih svojstava molekula i nano-čestica 2. Njihova primjena za određivanje optičkih svojstava nano-biomolekularnih hibridnih sistema 3. Osnove metoda molekularne dinamike: osnovnih i pobuđenih stanja za istraživanje dinamičkih svojstava molekula, nano-čestica i njihovih hibridnih sistema 4. Primjena molekularne dinamike za određivanje fluorescencije nano-bio sistema za biosenzoriku 5. Simuliranje katalitičkih svojstva metalnih čestica i primjena za unapređenje gorivih ćelija 6. Računarske metode za strukturalna i optička svojstva dvodimenzionalnih periodičnih sistema i njihova primjena za unapređenje svojstava materijala za solarne ćelije 					
Vrste izvođenja nastave:	<input checked="" type="checkbox"/> predavanja <input type="checkbox"/> seminari i radionice <input checked="" type="checkbox"/> vježbe <input type="checkbox"/> on line u cijelosti <input type="checkbox"/> mješovito e-učenje <input type="checkbox"/> terenska nastava		<input checked="" type="checkbox"/> samostalni zadaci <input type="checkbox"/> multimedija <input type="checkbox"/> laboratorij <input type="checkbox"/> mentorski rad <input type="checkbox"/> domaće zadaće			
Obveze studenata	Pohađanje predavanja i vježbi. Dva kolokvija iz gradiva obrađenog na predavanjima. Pismeni ispit (student koji sakupi više od 50% bodova iz oba kolokvija je oslobođen polaganja pismenog dijela ispita). Usmeni ispit. Priprema prezentacije odabranog znanstvenog članka.					

Praćenje rada studenata (<i>upisati udio u ECTS bodovima za svaku aktivnost tako da ukupni broj ECTS bodova odgovara bodovnoj vrijednosti predmeta</i>):	Naziv	Ects	Naziv	Ects	Naziv	Ects
	Pohađanje nastave	2	Istraživanje		Eksperimentalni rad	
	Usmeni ispit	1	Referat		Domaće zadaće	
	Seminarski rad		Esej			
	Kolokvij	2	Praktični rad			
	Pismeni ispit		Projekt			
Ocjenjivanje i vrjednovanje rada studenata tijekom nastave i na završnom ispitu	Dva kolokvija iz gradiva obrađenog na predavanjima Usmeni ispit					
Obvezna literatura (dostupna u knjižnici i putem ostalih medija)	Naslov			Broj primjeraka u knjižnici	Dostupnost putem ostalih medija	
	[1] F. Jensen: "Introduction to computational chemistry", John Wiley and Sons, 2007.			0		
	[2] M.P.Allen, D.J.Tildesley: "Computer Simulation in Chemical Physics", Kluwer Academic Publishers, 1993.			0		
	[3] Carsten A. Ullrich: „Time-Dependent Density-Functional Theory; Concepts and Applications“, Oxford Graduate Texts, 2011.			0		
Dopunska literatura	<p>[1] R. Mitrić, J. Petersen, V. Bonačić-Koutecký: Nonadiabatic Dynamics "on the fly" in Complex Systems and its Control by Laser Fields", in Conical Intersections II, Ed. by H. Köppel, W. Domcke and D. Yarkony, World Scientific 2011.</p> <p>[2] W. Domcke, D. R. Yarkony, H. Köppel Conical Intersections, World scientific Publishing, 2011.</p> <p>[3] P. E. Hoggan, E. J. Brändas, J. Maruani, P. Piecuch, G. Delgado-Barrio Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics, Springer, 2012.</p>					
Načini praćenja kvalitete koji osiguravaju stjecanje utvrđenih ishoda učenja	Anonimna anketa nakon održane nastave poslužit će da se identificiraju slabe točke u strukturi i izvedbi kolegija. Statistika ispitnih rezultata i studentsko evaluiranje putem anonimne ankete na kraju izvedbe predmeta. Anketa se provodi prema pravilniku Sveučilišta u Splitu.					
Ostalo (prema mišljenju predlagatelja)						