



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Modelowanie komputerowe materiałów w skali atomowej

Przedmiot

Kierunek studiów

Fizyka Techniczna

Studia w zakresie (specjalność)

Poziom studiów

pierwszego stopnia

Forma studiów

stacjonarne

Rok/semestr

3/5

Profil studiów

ogólnoakademicki

Język oferowanego przedmiotu

polski

Wymagalność

obieralny

Liczba godzin

Wykład

30

Ćwiczenia

Laboratoria

30

Projekty/seminaria

Inne (np. online)

Liczba punktów ECTS

5

Wykładowcy

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

dr hab. Arkadiusz Ptak, prof. PP

arkadiusz.ptak@put.poznan.pl

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Technicznej

Piotrowo 3, 60-965 Poznań

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

Wymagania wstępne

Wiedza z fizyki kwantowej i klasycznej w zakresie wykładanym na kierunku "fizyka techniczna".

Umiejętność rozwiązywania prostych problemów fizycznych w oparciu o posiadaną wiedzę, umiejętność pozyskiwania informacji ze wskazanych źródeł. Zrozumienie konieczności poszerzania swoich kompetencji, gotowość do podjęcia współpracy w ramach zespołu.

Cel przedmiotu

1. Przekazanie studentom podstawowej wiedzy i umiejętności w zakresie modelowania komputerowego materiałów, w szczególności cząsteczek i nanocząstek, w skali atomowej.

2. Rozwijanie u studentów umiejętności analizy jakościowej i ilościowej zjawisk fizycznych, zachodzących na poziomie molekularnym i atomowym, w oparciu o symulacje komputerowe.



Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza

1. Student zna i rozumie podstawowe zasady modelowania molekularnego wykorzystującego prawa fizyki klasycznej [K1_W01].
2. Student zna i rozumie podstawowe metody modelowania w skali atomowej wykorzystującego idee fizyki kwantowej, w tym metody z pierwszych zasad, metody półempiryczne oraz metody DFT (czyli oparte na teorii funkcjonału gęstości elektronowej) [K1_W04].

Umiejętności

Student potrafi:

1. poprawnie wykorzystać standardowe narzędzia analityczne, w tym numeryczne i obliczeniowe, do rozwiązywania szczegółowych problemów fizycznych i technicznych; potrafi krytycznie ocenić wyniki takiej analizy [K1_U09];
2. przeprowadzić modelowanie i symulacje komputerowe z wykorzystaniem standardowego oprogramowania wykorzystującego metody klasyczne i kwantowe [K1_U19];
3. wybrać metodę modelowania do rozwiązania problemu fizycznego, a także ustalić niezbędne zasoby komputerowe do wykonania zadania obliczeniowego [K1_U02, K1_U09, K1_U14].

Kompetencje społeczne

Student zdobywa kompetencje pozwalające na:

1. odpowiedzialną pracę nad wyznaczonym zadaniem, zarówno samodzielnie, jak i w zespole, przyjmując w nim różne role [K1_K01];
2. zrozumienie potrzeby i ustalenie możliwości ciągłego doksztalcania się w celu podnoszenia kompetencji zawodowych i społecznych [K1_K03].

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Efekt kształcenia (symbol)	Metoda weryfikacji	Kryteria oceny
Wykład:		
W01, W04, U09, K01, K03	test z pytaniami otwartymi	3: 50.1%-70.0%
		4: 70.1%-90.0%
		5: od 90.1%
Laboratorium:		
U09, U14, U19, K01, K03	ocena aktywności w laboratorium, raport	3: 50.1%-70.0%
		4: 70.1%-90.0%



Treści programowe

1. Wprowadzenie do modelowania i symulacji komputerowych.
2. Modelowanie w skali atomowej; rodzaje obliczeń: optymalizacja energii, właściwości elektronowe i z nich wynikające, symulacje dynamiki molekularnej.
3. Metody mechaniki klasycznej (molekularnej).
4. Metody mechaniki kwantowej:
 - a) metody chemii kwantowej: ab-initio i półempiryczne;
 - b) metody oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT) – twierdzenia Hohenberga-Kohna, równanie Kohna-Shama.
5. Porównanie metod klasycznych i kwantowych.
6. Symulacje dynamiki molekularnej.
7. Elementy komputerowo wspomaganego projektowanie leków – dokowanie ligandów.

Metody dydaktyczne

1. Wykład konwersatoryjny: prezentacja multimedialna, pokazy symulacji.
2. Ćwiczenia laboratoryjne: przeprowadzanie modelowania i symulacji komputerowych, indywidualne projekty, dyskusja, praca w zespołach.

Literatura

Podstawowa

1. Materiały z wykładów (po polsku)
2. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications, D. Frenkel, B. Smit, Academic Press

Uzupełniająca

1. Molecular Modeling Techniques in Material Sciences, J.-R. Hill, L. Subramanian, A. Maiti, Taylor&Francis 2005
2. Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide, T. Schlick, 2nd edition, Springer 2010
3. <http://www.molnet.eu> (po polsku)



Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	125	5,0
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	65	
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych, przygotowanie do testów/egzaminu, wykonanie projektów) ¹	60	

¹ niepotrzebne skreślić lub dopisać inne czynności