



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputerowe modelowanie materiałów, PG_00052082						
Kierunek studiów	Nanotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2020 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2022/2023		
Poziom kształcenia	I stopnia - inżynierskie	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	3	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	6	Liczba punktów ECTS			5.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Nanotechnologii i Inżynierii Materiałowej -> Zakład fizyki układów nieuporządkowanych						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr inż. Szymon Winczewski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr inż. Szymon Winczewski Jagoda Budnik					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	15.0	0.0	45.0	0.0	0.0	60
	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	60		6.0		59.0	125
Cel przedmiotu	Główny celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z metodami symulacji atomistycznych stosowanymi do badania oraz przewidywania właściwości rzeczywistych materiałów. W ramach przedmiotu omawia się metody klasycznej dynamiki molekularnej. Celem przedmiotu jest również zapoznanie studentów z szeregiem programów obliczeniowych i narzędziowych stosowanych powszechnie w tej dziedzinie.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K6_U03] Posiada umiejętność programowania w wybranym języku oraz stosowania podstawowych pakietów oprogramowania.	Student potrafi przygotować oraz przeprowadzić symulacje atomistyczne, wykorzystując do tego celu omówione na zajęciach oprogramowanie obliczeniowe. Student potrafi wykorzystać narzędzia graficzne do wizualizacji rezultatów symulacji.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K6_W04] Ma podstawową wiedzę o narzędziach informatycznych (procesorach tekstu, arkuszach kalkulacyjnych, itd.), tworzeniu prezentacji multimedialnych oraz programowaniu i grafice komputerowej.	Student zna narzędzia służące do analizy wyników obliczeń numerycznych. Student wie jak należy przedstawić uzyskane wyniki w postaci sprawozdania.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K6_W06] Ma podstawową wiedzę w zakresie nauki o materiałach (struktura ciał krystalicznych i amorficznych, wiązania krystaliczne, defekty strukturalne i ich wpływ na właściwości materiałów, drgania sieci i właściwości cieplne materiałów, struktura elektronowa, wybrane zjawiska transportu).	Student świadom jest związków pomiędzy mikrostrukturą a makroskopowymi właściwościami materiałów. Student wie jak specyfika oddziaływań międzyatomowych wpływa na właściwości materiałów. Student zna podstawowe termodynamiczne funkcje odpowiedzi.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
[K6_U02] Potrafi analizować i rozwiązywać proste problemy naukowe i techniczne w oparciu o posiadaną wiedzę, stosując metody analityczne, numeryczne, symulacyjne i eksperymentalne.	Student potrafi podejść krytycznie do uzyskanych z symulacji rezultatów. Student potrafi wskazać ograniczenia zastosowanego modelu oraz zaproponować metody jego korekcji.	[SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU1] Ocena realizacji zadania	
Treści przedmiotu	<ol style="list-style-type: none"> 1. Metody definiowania struktury układów atomowych. 2. Metody wizualizacji układów atomowych (programy Visual Molecular Dynamics oraz Ovito). 3. Metody opisu oddziaływań międzyatomowych (potencjał Lennarda-Jonesa, pole siłowe AIREBO, potencjały wielociałowe). 4. Metody numerycznego rozwiązywania równań ruchu (klasyczny i prędkościowy algorytm Verleta). 5. Techniki symulacyjne: przygotowanie oraz przeprowadzenie symulacji (program LAMMPS). 6. Opracowanie wyników symulacji (program Gnuplot). 7. Zespoły statystyczne. 8. Termodynamiczne funkcje odpowiedzi. 9. Metody badania właściwości mechanicznych układów atomowych. 10. Metody analizy struktury. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Student zna podstawy fizyki ciała stałego oraz termodynamiki.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Realizacja zadań	50.0%	50.0%
	Pisemne sprawozdania	50.0%	25.0%
	Test z wiedzy teoretycznej	50.0%	25.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. Dennis C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Oxford 2004. 2. Dieter W. Heerman, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997. 3. Furio Ercolessi, A molecular dynamics primer. 4. Vasily Bulatov, Wei Cai, Computer Simulations of Dislocations, Oxford University Press, Oxford 2006. 5. Daan Frenkel, Berend Smit, Understanding molecular simulation: from algorithmsto applications, 2nd ed., Academic Press, 2002. 6. Andrew R. Leach, Molecular modelling: principles and applications, 2nd ed., Prentice Hall, 2001. 	
	Uzupełniająca lista lektur	brak	
	Adresy eZasobów	Podstawowe https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=24373 - Komputerowe Modelowanie Materiałów 2022/2023 - kurs on-line na platformie e-Nauczanie Adresy na platformie eNauczanie: Komputerowe Modelowanie Materiałów 2022/2023 - Moodle ID: 24373 https://enauczanie.pg.edu.pl/moodle/course/view.php?id=24373	

Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<ol style="list-style-type: none">1. Konstrukcja prostych układów atomowych.2. Graficzne opracowanie danych.3. Właściwości dimeru argonu.4. Właściwości monokryształu fcc argonu (pojemność cieplna, temperatura topnienia, rozszerzalność cieplna)5. Właściwości mechaniczne wybranych monokryształów.
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy