

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputerowe modelowanie materiałów, PG_00052082						
Kierunek studiów	Nanotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2023 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2025/2026		
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	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> 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				
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						
	Adresy kursu na platformie eNauczanie: Moodle ID: 1192 Komputerowe modelowanie materiałów 2025/2026 https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1192						
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	Celem przedmiotu jest zapoznanie studentów z metodami symulacji w skali atomowej, w szczególności zaś z metodą dynamiki molekularnej. Swymi ramami przedmiot obejmuje wykład, który omawia od strony teoretycznej różne aspekty symulacji, oraz laboratorium, w trakcie którego studenci poznają już praktyczne oblicze symulacji, zapoznając się także z oprogramowaniem naukowym wykorzystywanym w dziedzinie.						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[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.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
	[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.	[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
	[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.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania
	[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.	[SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej
Treści przedmiotu	Wykład 1. Rola i znaczenie symulacji komputerowej. 2. Metoda dynamiki molekularnej - idea i zarys. 3. Opis oddziaływań. Potencjał Lennarda-Jonesa. Siła oddziaływania. 4. Numeryczne całkowanie równań ruchu. Podstawowy i prędkościowy algorytm Verleta. 5. Warunki brzegowe. Pudła symulacyjne. 6. Identyfikacja najbliższych sąsiadów. Odcięcie potencjału. Promień odcięcia. 7. Metoda list połączonych cel oraz metoda Verleta. 8. Startowanie symulacji. Dobór położeń początkowych i prędkości początkowych. Równoważenie i próbkowanie. 9. Obliczanie podstawowych parametrów termodynamicznych. Laboratorium komputerowe 1. Definiowanie i wizualizowanie układów atomowych. 2. Zapoznanie z programem VMD. 3. Opracowanie i prezentacja wyników obliczeń numerycznych w programie gnuplot. 4. Zapoznanie z programem LAMMPS. 5. Przygotowanie, przeprowadzenie oraz analiza rezultatów symulacji MD. 6. Badanie drgań cząsteczki Ar₂ na podstawie symulacji MD. 7. Wyznaczenie ciepła właściwego monokryształu argonu na podstawie symulacji MD. 8. Zapoznanie z programem OVITO. 9. Wyznaczenie modułu objętościowego monokryształu argonu na podstawie symulacji MD.		
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 oceny 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	1. Dennis C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Oxford 2004.	
	Uzupełniająca lista lektur	1. Dieter W. Heerman, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997. 2. Furio Ercolessi, A molecular dynamics primer. 3. Vasily Bulatov, Wei Cai, Computer Simulations of Dislocations, Oxford University Press, Oxford 2006. 4. Daan Frenkel, Berend Smit, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, 2nd ed., Academic Press, 2002. 5. Andrew R. Leach, Molecular modelling: principles and applications, 2nd ed., Prentice Hall, 2001.	

	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. Przedstaw schemat blokowy algorytmu stosowanego w symulacji metodą dynamiki molekularnej. Krótko omów każdy z realizowanych zabiegów. 2. Przedstaw (zapisz, wyjaśniając symbole) wyrażenie na energię potencjalną układu N atomów oddziałujących potencjałem Lennarda-Jonesa. Wyjaśnij sens fizyczny tego wyrażenia. 3. Wychodząc z rozwinięcia funkcji w szereg Taylora, wyprowadź podstawowy algorytm Verleta. Wyjaśnij, jakie wady posiada ta metoda i z czego one wynikają? 4. Wyjaśnij, w jaki sposób stosowanie periodycznych warunków brzegowych wpływa na algorytm symulacji MD. Które aspekty/etapy algorytmu wymagają zmian/modyfikacji? Jak zmiany te wyglądają/na czym polegają? 5. Omów problem identyfikacji najbliższych sąsiadów. Na czym on polega? Dlaczego jest istotny? Jakie metody wykorzystuje się do identyfikacji najbliższych sąsiadów?	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.