

## Karta przedmiotu

|                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                           |                                                                                                                                                                                                                                            |                        |                                                                                                                                                                                        |                       |       |
|------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu                   | Komputerowe modelowanie materiałów, PG_00063398                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                           |                                                                                                                                                                                                                                            |                        |                                                                                                                                                                                        |                       |       |
| Kierunek studiów                         | Nanotechnologia                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                           |                                                                                                                                                                                                                                            |                        |                                                                                                                                                                                        |                       |       |
| Data rozpoczęcia studiów                 | październik 2024 r.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                           | Rok akademicki realizacji przedmiotu                                                                                                                                                                                                       |                        | 2026/2027                                                                                                                                                                              |                       |       |
| Poziom kształcenia                       | I stopnia - inżynierskie                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                           | Grupa zajęć                                                                                                                                                                                                                                |                        | Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów<br>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                                                                                                                                                                                                                        |                        | 6.0                                                                                                                                                                                    |                       |       |
| 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                           |                                                                                                                                                                                                                                            |                        |                                                                                                                                                                                        |                       |       |
| 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                                                        |                                                                                                                                                                                                                                            | 10.0                   |                                                                                                                                                                                        | 80.0                  | 150   |
| 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.                                                                 |                        | [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania<br>[SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu<br>[SU1] Ocena realizacji zadania   |                       |       |
|                                          | [K6_W04] ma 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<br>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej                                                                                |                       |       |
|                                          | [K6_U03] posiada umiejętność programowania w wybranym języku oraz stosowania wybranych 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<br>[SU1] Ocena realizacji zadania                                                                                              |                       |       |

|                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
|-------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|----------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|----------------------|-------|-------|------------------|-------|-------|--|--|
| Treści przedmiotu                                                 | <p>Wykład</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Rola i znaczenie symulacji komputerowej.</li><li>2. Metoda dynamiki molekularnej - idea i zarys.</li><li>3. Opis oddziaływań. Potencjał Lennarda-Jonesa. Siła oddziaływania.</li><li>4. Numeryczne całkowanie równań ruchu. Podstawowy i prędkościowy algorytm Verleta.</li><li>5. Warunki brzegowe. Pułta symulacyjne.</li><li>6. Identyfikacja najbliższych sąsiadów. Odcięcie potencjału. Promień odcięcia.</li><li>7. Metoda list połączonych cel oraz metoda Verleta.</li><li>8. Startowanie symulacji. Dobór położeń początkowych i prędkości początkowych. Równoważenie i próbkowanie.</li><li>9. Obliczanie podstawowych parametrów termodynamicznych.</li></ol> <p>Laboratorium komputerowe</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Definiowanie i wizualizowanie układów atomowych.</li><li>2. Zapoznanie z programem VMD.</li><li>3. Opracowanie i prezentacja wyników obliczeń numerycznych w programie gnuplot.</li><li>4. Zapoznanie z programem LAMMPS.</li><li>5. Przygotowanie, przeprowadzenie oraz analiza rezultatów symulacji MD.</li><li>6. Badanie drgań cząsteczki Ar2 na podstawie symulacji MD.</li><li>7. Wyznaczenie ciepła właściwego monokryształu argonu na podstawie symulacji MD.</li><li>8. Zapoznanie z programem OVITO.</li><li>9. Wyznaczenie modułu objętościowego monokryształu argonu na podstawie symulacji MD.</li></ol> |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Wymagania wstępne i dodatkowe                                     | Student zna podstawy fizyki ciała stałego oraz termodynamiki.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się     | <table><tr><td>Sposób oceniania (składowe)</td><td>Próg zaliczeniowy</td><td>Składowa oceny końcowej</td></tr><tr><td>Test z wiedzy teoretycznej</td><td>50.0%</td><td>25.0%</td></tr><tr><td>Pisemne sprawozdania</td><td>50.0%</td><td>25.0%</td></tr><tr><td>Realizacja zadań</td><td>50.0%</td><td>50.0%</td></tr></table>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | Sposób oceniania (składowe) | Próg zaliczeniowy                                                                                                  | Składowa oceny końcowej | Test z wiedzy teoretycznej | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 25.0% | Pisemne sprawozdania | 50.0% | 25.0% | Realizacja zadań | 50.0% | 50.0% |  |  |
| Sposób oceniania (składowe)                                       | Próg zaliczeniowy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Składowa oceny końcowej     |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Test z wiedzy teoretycznej                                        | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 25.0%                       |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Pisemne sprawozdania                                              | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 25.0%                       |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Realizacja zadań                                                  | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 50.0%                       |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Zalecana lista lektur                                             | <table><tr><td>Podstawowa lista lektur</td><td colspan="2">1. Dennis C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Oxford 2004.</td></tr><tr><td>Uzupełniająca lista lektur</td><td colspan="2"><ol style="list-style-type: none"><li>1. Dieter W. Heerman, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997.</li><li>2. Furio Ercolessi, <a href="#">A molecular dynamics primer</a>.</li><li>3. Vasily Bulatov, Wei Cai, Computer Simulations of Dislocations, Oxford University Press, Oxford 2006.</li><li>4. Daan Frenkel, Berend Smit, Understanding molecular simulation: from algorithmsto applications, 2nd ed., Academic Press, 2002.</li><li>5. Andrew R. Leach, Molecular modelling: principles and applications, 2nd ed.,Prentice Hall, 2001.</li></ol></td></tr><tr><td>Adresy eZasobów</td><td colspan="2"></td></tr></table>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | Podstawowa lista lektur     | 1. Dennis C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Oxford 2004. |                         | Uzupełniająca lista lektur | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Dieter W. Heerman, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997.</li><li>2. Furio Ercolessi, <a href="#">A molecular dynamics primer</a>.</li><li>3. Vasily Bulatov, Wei Cai, Computer Simulations of Dislocations, Oxford University Press, Oxford 2006.</li><li>4. Daan Frenkel, Berend Smit, Understanding molecular simulation: from algorithmsto applications, 2nd ed., Academic Press, 2002.</li><li>5. Andrew R. Leach, Molecular modelling: principles and applications, 2nd ed.,Prentice Hall, 2001.</li></ol> |       | Adresy eZasobów      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Podstawowa lista lektur                                           | 1. Dennis C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Oxford 2004.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Uzupełniająca lista lektur                                        | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Dieter W. Heerman, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1997.</li><li>2. Furio Ercolessi, <a href="#">A molecular dynamics primer</a>.</li><li>3. Vasily Bulatov, Wei Cai, Computer Simulations of Dislocations, Oxford University Press, Oxford 2006.</li><li>4. Daan Frenkel, Berend Smit, Understanding molecular simulation: from algorithmsto applications, 2nd ed., Academic Press, 2002.</li><li>5. Andrew R. Leach, Molecular modelling: principles and applications, 2nd ed.,Prentice Hall, 2001.</li></ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Adresy eZasobów                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania | <ol style="list-style-type: none"><li>1. Przedstaw schemat blokowy algorytmu stosowanego w symulacji metodą dynamiki molekularnej. Krótko omów każdy z realizowanych zabiegów.</li><li>2. Przedstaw (zapisz, wyjaśniając symbole) wyrażenie na energię potencjalną układu N atomów oddziałujących potencjałem Lennarda-Jonesa. Wyjaśnij sens fizyczny tego wyrażenia.</li><li>3. Wychodząc z rozwinięcia funkcji w szereg Taylora, wyprowadź podstawowy algorytm Verleta. Wyjaśnij, jakie wady posiada ta metoda i z czego one wynikają?</li><li>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?</li><li>5. Omów problem identyfikacji najbliższych sąsiadów. Na czym on polega? Dlaczego jest istotny? Jakie metody wykorzystuje się do identyfikacji najbliższych sąsiadów?</li></ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |
| Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu                             | Nie dotyczy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                             |                                                                                                                    |                         |                            |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |       |                      |       |       |                  |       |       |  |  |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.