

# Karta przedmiotu

|                                          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                           |                                                              |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
|------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|-------|
| Nazwa i kod przedmiotu                   | Materials Science - classical particle approach, PG_00063960                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                           |                                                              |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
| Kierunek studiów                         | Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                                                           |                                                              |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
| Data rozpoczęcia studiów                 | październik 2024 r.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                           | Rok akademicki realizacji przedmiotu                         |                        | 2025/2026                                                                                                                                                       |                       |       |
| Poziom kształcenia                       | II stopnia                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                                                           | Grupa zajęć                                                  |                        | Grupa zajęć specjalnościowych<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                              | 2                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                           | Język wykładowy                                              |                        | angielski                                                                                                                                                       |                       |       |
| Semestr studiów                          | 3                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                           | 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 hab. inż. Jacek Dziedzic                                  |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
|                                          | Prowadzący zajęcia z przedmiotu                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                           | dr inż. Szymon Winczewski<br><br>dr hab. inż. Jacek Dziedzic |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
| Formy zajęć i metody nauczania           | Forma zajęć                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Wykład                                                    | Ćwiczenia                                                    | Laboratorium           | Projekt                                                                                                                                                         | Seminarium            | RAZEM |
|                                          | Liczba godzin zajęć                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 30.0                                                      | 0.0                                                          | 45.0                   | 0.0                                                                                                                                                             | 0.0                   | 75    |
|                                          | W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                           |                                                              |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
|                                          | Adres kursu na platformie eNauczanie: <a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1135">https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1135</a><br>Moodle ID: 1135 Materials Science - classical particle approach (zima 25/26)<br><a href="https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1135">https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1135</a>                                                                                                                        |                                                           |                                                              |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |
| 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 75                                                        |                                                              | 5.0                    |                                                                                                                                                                 | 70.0                  | 150   |
| Cel przedmiotu                           | Omówienie metod cząstek w zastosowaniu do zagadnień modelowania układów w skali nano. Szczegółowe omówienie metody dynamiki molekularnej: teorii (całkowanie równań ruchu) oraz zagadnień praktycznych (stosowane potencjały, warunki brzegowe, inicjalizacja symulacji, sąsiedztwo, promień odcięcia). Krótki przegląd bardziej zaawansowanych zagadnień z dziedziny dynamiki molekularnej (wybrane zagadnienia: np. molekuly sztywne, model powłokowy, dynamika z więzami, termostaty, barostaty, metoda Ewalda). |                                                           |                                                              |                        |                                                                                                                                                                 |                       |       |

|                                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                 |
|---------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Efekty uczenia się przedmiotu                                 | Efekt kierunkowy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Efekt z przedmiotu                                                                                                                                                                                                                            | Sposób weryfikacji i oceny efektu                                                                                                                                                                               |
|                                                               | [K7_U03] posiada pogłębioną umiejętność posługiwania się zaawansowanymi pakietami oprogramowania specjalistycznego.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Student jest w stanie samodzielnie przeprowadzić symulację metodą dynamiki molekularnej przy użyciu pakietu LAMMPS oraz zinterpretować najważniejsze otrzymane wyniki.                                                                        | [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania<br>[SU1] Ocena realizacji zadania                                                                                                           |
|                                                               | [K7_W01] posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę w zakresie nauki o materiałach.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Student rozumie koncepcje uporządkowania, przejścia fazowego. Posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę dotyczącą symulacji klasycznymi metodami cząstek w dziedzinie inżynierii materiałowej.                                                | [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym<br>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej                                                                                                         |
|                                                               | [K7_U06] potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie – w ramach specjalności.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Student potrafi zaplanować i przeprowadzić prostą symulację przy wykorzystaniu pakietu LAMMPS oraz dokonać krytycznej analizy otrzymanych wyników, przeprowadzić wizualizację trajektorii, wykreślić wykresy kluczowych parametrów symulacji. | [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania<br>[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi<br>[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji<br>[SU1] Ocena realizacji zadania |
|                                                               | [K7_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Student dysponuje pogłębioną znajomością metod cząstek (dynamiki molekularnej) i jest świadom ich ograniczeń, potrafi umiejscowić metody klasyczne i kwantowe w krajobrazie metod obliczeniowych używanych w nanoskali.                       | [SW1] Ocena wiedzy faktograficznej                                                                                                                                                                              |
| Treści przedmiotu                                             | <p><b>Wykład:</b></p> <p>Najważniejsze pytania, które stawiamy modelując układy w skali nano. Czym jest cząstka? Równanie dynamiczne. Metody klasyczne i kwantowe, skalowanie nakładu obliczeniowego. Metoda dynamiki molekularnej, jej zalety i ograniczenia, zachowanie energii w mechanice newtonowskiej. Przestrzeń fazowa i trajektorie. Periodyczne i mieszane warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, kwazini skończoność, ograniczenia podejścia PBC. Promień odcięcia i jego konsekwencje. Metoda cel połączonych Hockneya i lista sąsiadów Verleta. Sposoby inicjowania symulacji (położenia, prędkości), równoważenie. Metody całkowania równań ruchu. Metoda Verleta, leapfrog, metody predictor-corrector. Źródła błędów całkowania równań ruchu. Wizualizacja w symulacjach MD i obliczanie obserwabli makroskopowych (energii, temperatury, wiriału, ciśnienia, ciepła właściwego, RDF, ADF, S(k), MSD, D(T)). Potencjał i jego związek z siłą. Ogólne i szczególne formy potencjałów. Potencjały LJ, miękkich i sztywnych kul, Borna-Mayera, harmoniczny, Morse'a, Stillinger-Webera, Suttona-Chena, GAFF, AMOEBA). Polaryzowalność i modele powłokowe (Cochrana, Finchama). Dynamika z więzami, podejście formalne, SHAKE, RATTLE, QSHAKE. Molekuły sztywne w symulacjach MD, kąty Eulera, macierz obrotów, przekształcenia wektorów, kwaterniony. Oddziaływania kulombowskie w symulacjach MD, metoda Ewalda. Zespoły NVT i NpT, termostaty prymitywne, termostaty i barostaty ESM i CSM. Metody hybrydowe (QM/MM).</p> <p><b>Laboratorium:</b></p> <p>Celem przedmiotu jest także zapoznanie studentów z praktycznymi aspektami modelowania w skali atomowej, co zrealizowane zostanie na laboratorium komputerowym. Swoimi ramami obejmuje ono następujące zagadnienia:</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 Ar<sub>2</sub> 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 jest zaznajomiony z mechaniką newtonowską. Student zna podstawy budowy materii. Student zna podstawy analizy matematycznej i algebry.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                 |
| Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się | Sposób oceniania (składowe)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Próg zaliczeniowy                                                                                                                                                                                                                             | Składowa oceny końcowej                                                                                                                                                                                         |
|                                                               | Zaliczenie pisemne                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                         | 50.0%                                                                                                                                                                                                           |
|                                                               | Raporty z ćwiczeń laboratoryjnych                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 50.0%                                                                                                                                                                                                                                         | 50.0%                                                                                                                                                                                                           |
| Zalecana lista lektur                                         | Podstawowa lista lektur                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 1. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 2004.                                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                 |

|                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                         | <p>Uzupełniająca lista lektur</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. D. Frenkel, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001.</li> <li>2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1989.</li> <li>3. V. Bulatov, W. Cai, Computer simulations of dislocations, Oxford University Press, 2006.</li> <li>4. E.B. Tadmor, R.F. Miller, Modeling Materials, Cambridge University Press, 2011.</li> <li>5. Materiały rozdane przez prowadzącego.</li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|                                                                         | <p>Adresy eZasobów</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Przykładowe zagadnienia/<br>przykładowe pytania/<br>realizowane zadania | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Jakie są typowe rozmiary układu i skale czasowe dla których przeprowadza się symulacje metodą dynamiki molekularnej? Dlaczego metody continuum nie mają zastosowania dla tego typu układów?</li> <li>2. Jakie są główne różnice między klasycznymi a kwantowymi metodami obliczeniowego badania układów w skali nano?</li> <li>3. Pokróćce (w kilku-kilkunastu zdaniach) wyjaśnij w jaki sposób działa metoda dynamiki molekularnej(MD).</li> <li>4. Kiedy energia całkowita jest zachowana w symulacji metodą MD, a kiedy nie jest?</li> <li>5. Jakie są główne ograniczenia metody dynamiki molekularnej?</li> <li>6. Omów pojęcie okresowych warunków brzegowych na czym polegają, w jakim celu się je stosuje, jakie są ich ograniczenia i trudności związane z ich stosowaniem.</li> <li>7. Krótko opisz techniki numeryczne, które umożliwiają zwiększenie wydajności (przyspieszenie) symulacji metodą MD.</li> <li>8. Co to jest promień odcięcia potencjału? Po co się go stosuje? Jakie trudności wiążą się z przyjęciem skończonego promienia odcięcia?</li> <li>9. Opisz metodę cel połączonych Hockneya oraz technikę listy Verleta. Co umożliwiają te techniki? Streść wady i zalety każdej z nich.</li> <li>10. Opisz w jaki sposób wygenerował(a)byś początkowe położenia i prędkości atomów do symulacji cieczy za pomocą metody MD.</li> <li>11. Opisz w jaki sposób wygenerował(a)byś początkowe położenia i prędkości atomów do symulacji kryształu za pomocą metody MD.</li> <li>12. Do czego służy i w jaki sposób jest realizowana technika skew start?</li> <li>13. Na czym polega proces równoważenia (equilibration) układu w symulacji metodą MD? Wymień kilka najważniejszych zasad którymi kierował(a)byś przeprowadzając równoważenie.</li> <li>14. Wyprowadź wzory Verleta na prędkość oraz na położenie w kolejnym kroku symulacji.</li> <li>15. Do czego służą i na czym polegają algorytmy typu predictor-corrector? Jakie są ich zalety w porównaniu z konkurencyjnymi algorytmami?</li> <li>16. Czym jest radialna funkcja rozkładu (RDF)? W jaki sposób można ją obliczyć?</li> <li>17. Naszkicuj jak wygląda typowy wykres radialnej funkcji rozkładu (RDF) dla ciała stałego w fazie krystalicznej, dla cieczy i dla gazu. Jak zachowuje się radialna funkcja rozkładu wraz ze wzrostem r?</li> <li>18. Jakie dodatkowe informacje o układzie możemy otrzymać obliczwszy jego radialną funkcję rozkładu(RDF)? Jak wyznaczyć te informacje?</li> <li>19. Co to jest odchylenie średniokwadratowe (MSD) w symulacji metodą MD? W jaki sposób możemy je wyznaczyć? Jakie informacje niesie?</li> <li>20. Co to jest kątowa funkcja rozkładu? Naszkicuj jej typowy przebieg dla różnych układów.</li> <li>21. W jaki sposób w symulacji MD możemy wyznaczyć współczynnik samodyfuzji? Jaką informację niesie?</li> <li>22. Jaką rolę w symulacji metodą MD pełni potencjał? Jak jest związany z siłą działającą na i-ty atom? Podaj jego ogólną postać przyjmowaną w praktyce.</li> <li>23. Narysuj przebieg potencjału Lennarda-Jonesa. Jakim wzorem jest on dany? Wyjaśnij znaczenie symboli występujących we wzorze. Jakie układy dobrze opisuje ten potencjał?</li> <li>24. Jakim wzorem dany jest potencjał Lennarda-Jonesa? Jakie zjawiska fizyczne modeluje każdy z członów tego potencjału?</li> <li>25. Potencjał sztywnych kul, Borna-Mayera, harmoniczny i potencjał Morse'a opisz wybrane trzy spośród tych czterech potencjałów.</li> <li>26. Porównaj potencjały Stillinger-Webera i Suttona-Chena. Do jakich układów należałoby zastosować pierwszy, a do jakich drugi z nich?</li> <li>27. Scharakteryzuj krótko potencjał stosowany w programie AMBER. Jakie efekty modeluje każdy z członów tego potencjału?</li> <li>28. Scharakteryzuj potencjał polaryzowalny AMOEBA.</li> <li>29. W jaki sposób obliczamy ciśnienie w symulacjach MD? Przedstaw skrócone wyprowadzenie.</li> <li>30. Opisz szczegółowo metodę Ewala. Co to podejście ma na celu? W jakich układach je stosujemy?</li> <li>31. Na czym polega dynamika z więzami (constrained dynamics). Podaj przykłady kiedy warto byłoby ją zastosować.</li> <li>32. Krótko opisz podejście formalne oraz podejście SHAKE do realizacji dynamiki z więzami (constrained dynamics).</li> <li>33. Omów krótko termostat Berendsena i termostat Andersena.</li> <li>34. Opisz ogólne sposoby utrzymania stałej temperatury w symulacji metodą MD.</li> <li>35. Na czym polegają modele powłokowe (shell models)? Kiedy są stosowane? Wyjaśnij w skrócie czym różni się model statyczny Cochra od modelu dynamicznego Finchama?</li> </ol> |
| Praktyki zawodowe<br>w ramach przedmiotu                                | Nie dotyczy                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.