

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - classical particle approach, PG_00063960						
Kierunek studiów	Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	październik 2025 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2026/2027		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć specjalnościowych 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 hab. inż. Jacek Dziedzic					
Formy zajęć	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: https://enauczanie.pg.edu.pl/2025/course/view.php?id=1135						
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_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.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników 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
	[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.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
[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.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania	
Treści przedmiotu	<p>Treści przedmiotu - wykład Wykład:</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, kwaziniestończoność, 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>Laboratorium:</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"> 1) Definiowanie i wizualizowanie układów atomowych. 2) Zapoznanie z programem VMD. 3) Opracowanie i prezentacja wyników obliczeń numerycznych w programie gnuplot. 4) Zapoznanie z programem LAMMPS. 5) Przygotowanie, przeprowadzenie oraz analiza rezultatów symulacji MD. 6) Badanie drgań cząsteczki Ar₂ na podstawie symulacji MD. 7) Wyznaczenie ciepła właściwego monokryształu argonu na podstawie symulacji MD. 8) Zapoznanie z programem OVITO. 9) Wyznaczenie modułu objętościowego monokryształu argonu na podstawie symulacji MD. 		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Student 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 ocena końcowej
	Raporty z ćwiczeń laboratoryjnych	50.0%	50.0%
	Zaliczenie pisemne	50.0%	50.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 2004.	

	Uzupełniająca lista lektur	<p>1. D. Frenkel, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001.</p> <p>2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1989.</p> <p>3. V. Bulatov, W. Cai, Computer simulations of dislocations, Oxford University Press, 2006.</p> <p>4. E.B. Tadmor, R.F. Miller, Modeling Materials, Cambridge University Press, 2011.</p> <p>5. Materiały rozdane przez prowadzącego.</p>
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania		<p>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?</p> <p>2. Jakie są główne różnice między klasycznymi a kwantowymi metodami obliczeniowego badania układów w skali nano?</p> <p>3. Pokróćce (w kilku-kilkunastu zdaniach) wyjaśnij w jaki sposób działa metoda dynamiki molekularnej(MD).</p> <p>4. Kiedy energia całkowita jest zachowana w symulacji metodą MD, a kiedy nie jest?</p> <p>5. Jakie są główne ograniczenia metody dynamiki molekularnej?</p> <p>6. Omów pojęcie periodycznych warunków brzegowych na czym polegają, w jakim celu się je stosuje, jakie są ich ograniczenia i trudności związane z ich stosowaniem.</p> <p>7. Krótko opisz techniki numeryczne, które umożliwiają zwiększenie wydajności (przyspieszenie) symulacji metodą MD.</p> <p>8. Co to jest promień odcięcia potencjału? Po co się go stosuje? Jakie trudności wiążą się z przyjęciem skończonego promienia odcięcia?</p> <p>9. Opisz metodę cel połączonych Hockneya oraz technikę listy Verleta. Co umożliwiają te techniki? Streść wady i zalety każdej z nich.</p> <p>10. Opisz w jaki sposób wygenerował(a)byś początkowe położenia i prędkości atomów do symulacji cieczy za pomocą metody MD.</p> <p>11. Opisz w jaki sposób wygenerował(a)byś początkowe położenia i prędkości atomów do symulacji kryształu za pomocą metody MD.</p> <p>12. Do czego służy i w jaki sposób jest realizowana technika skew start?</p> <p>13. Na czym polega proces równoważenia (equilibration) układu w symulacji metodą MD? Wymień kilka najważniejszych zasad którymi kierował(a)byś przeprowadzając równoważenie.</p> <p>14. Wyprowadź wzory Verleta na prędkość oraz na położenie w kolejnym kroku symulacji.</p> <p>15. Do czego służą i na czym polegają algorytmy typu predictor-corrector? Jakie są ich zalety w porównaniu z konkurencyjnymi algorytmami?</p> <p>16. Czym jest radialna funkcja rozkładu (RDF)? W jaki sposób można ją obliczyć?</p> <p>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?</p> <p>18. Jakie dodatkowe informacje o układzie możemy otrzymać obliczywszy jego radialną funkcję rozkładu(RDF)? Jak wyznaczyć te informacje?</p> <p>19. Co to jest odchylenie średniokwadratowe (MSD) w symulacji metodą MD? W jaki sposób możemy je wyznaczyć? Jakie informacje niesie?</p> <p>20. Co to jest kątowa funkcja rozkładu? Naszkicuj jej typowy przebieg dla różnych układów.</p> <p>21. W jaki sposób w symulacji MD możemy wyznaczyć współczynnik samodyfuzji? Jaką informację niesie?</p> <p>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.</p> <p>23. Narysuj przebieg potencjału Lennarda-Jonesa. Jakim wzorem jest on dany? Wyjaśnij znaczenie symboli występujących we wzorze. Jakie układy dobrze opisuje ten potencjał?</p> <p>24. Jakim wzorem dany jest potencjał Lennarda-Jonesa? Jakie zjawiska fizyczne modeluje każdy z członów tego potencjału?</p> <p>25. Potencjał sztywnych kul, Borna-Mayera, harmoniczny i potencjał Morse'a opisz wybrane trzy spośród tych czterech potencjałów.</p> <p>26. Porównaj potencjały Stillinger-Webera i Suttona-Chena. Do jakich układów należałoby zastosować pierwszy, a do jakich drugi z nich?</p> <p>27. Scharakteryzuj krótko potencjał stosowany w programie AMBER. Jakie efekty modeluje każdy z członów tego potencjału?</p> <p>28. Scharakteryzuj potencjał polaryzowalny AMOEBA.</p> <p>29. W jaki sposób obliczamy ciśnienie w symulacjach MD? Przedstaw skrócone wyprowadzenie.</p> <p>30. Opisz szczegółowo metodę Ewalda. Co to podejście ma na celu? W jakich układach je stosujemy?</p> <p>31. Na czym polega dynamika z więzami (constrained dynamics). Podaj przykłady kiedy warto byłoby ją zastosować.</p> <p>32. Krótko opisz podejście formalne oraz podejście SHAKE do realizacji dynamiki z więzami (constrained dynamics).</p> <p>33. Omów krótko termostat Berendsena i termostat Andersena.</p> <p>34. Opisz ogólne sposoby utrzymania stałej temperatury w symulacji metodą MD.</p> <p>35. Na czym polegają modele powłokowe (shell models)? Kiedy są stosowane? Wyjaśnij w skrócie czym różni się model statyczny Cochra od modelu dynamicznego Finchama?</p>
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.