



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Modelowanie i symulacje w nanotechnologii, PG_00070927						
Kierunek studiów	Nanotechnologia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2027/2028		
Poziom kształcenia	II stopnia		Grupa zajęć		Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne		Sposób realizacji		na uczelni		
Rok studiów	1		Język wykładowy		angielski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		2.0		
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	0.0	0.0	0.0	30
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach		Praca własna studenta	RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	30		2.0		18.0	50
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, wyznaczanie właściwości makroskopowych). 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_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, ich wytwarzania lub kontroli procesów towarzyszących wytwarzaniu ze szczególnym uwzględnieniem materiałów i struktur w skali nano		Student rozumie koncepcje uporządkowania, przejścia fazowego. Posiada poszerzoną i uporządkowaną wiedzę dotyczącą symulacji klasycznymi metodami cząstek w dziedzinie inżynierii materiałowej, w skali atomowej i nanoskali.		[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej		

Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - wykład 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, kwazienieskończoność, ograniczenia podejścia PBC. Promień odcięcia i jego konsekwencje. Metoda cel połączonych Hockneya i lista sąsiadów Verleta. Sposoby inicjowania symulacji (położeń, 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. Zespoły NVT i NpT, termostaty prymitywne, termostaty i barostaty ESM i CSM. Oddziaływania kulombowskie w symulacjach MD, metoda Ewalda.		
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%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 2004. 2. M.P. Allen, Introduction to Molecular Dynamics Simulation, Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Lecture Notes, Norbert Attig, Kurt Binder, Helmut Grubmuller, Kurt Kremer (Eds.), John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Vol. 23, ISBN 3-00-012641-4, pp. 1-28, 2004. 3. G. Ciccotti, S. Decherchi, S. Meloni, Foundations of molecular dynamics simulations: how and what, Riv. Nuovo Cim. 48, 194, Open Access, 2025. https://doi.org/10.1007/s40766-025-00065-4	
	Uzupełniająca lista lektur	1. D. Frenkel, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001. 2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1989. 3. V. Bulatov, W. Cai, Computer simulations of dislocations, Oxford University Press, 2006. 4. E.B. Tadmor, R.F. Miller, Modeling Materials, Cambridge University Press, 2011.	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1. Omów pojęcie periodycznych warunków brzegowych na czym polegają, w jakim celu się je stosuje, jakie są ich ograniczenia i trudności związane z ich stosowaniem. 2. Opisz metodę cel połączonych Hockneya oraz technikę listy Verleta. Co umożliwiają te techniki? Streść wady i zalety każdej z nich. 3. Na czym polega proces równoważenia (equilibration) układu w symulacji metodą MD? Wymień kilka najważniejszych zasad którymi kierował(a)byś przeprowadzając równoważenie. 4. Czym jest radialna funkcja rozkładu (RDF)? W jaki sposób można ją obliczyć? 5. Narysuj przebieg potencjału Lennarda-Jonesa. Jakim wzorem jest on dany? Wyjaśnij znaczenie symboli. 6. Scharakteryzuj potencjał polaryzowalny AMOEBA. 7. Omów krótko termostat Berendsena i termostat Andersena.		
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy		

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.