

Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Materials Science - classical particle approach, PG_00071216						
Kierunek studiów	Nanotechnologia, Nanotechnologia (studia w jęz. angielskim)						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2027 r.		Rok akademicki realizacji przedmiotu		2027/2028		
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	1		Język wykładowy		angielski		
Semestr studiów	2		Liczba punktów ECTS		4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki		Forma zaliczenia		zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydziały Politechniki Gdańskiej -> Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Instytut Nanotechnologii i Inżynierii Materiałowej -> Zakład Fizyki Układów Nieuporządkowanych						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr inż. Szymon Winczewski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	45.0	0.0	0.0	45
	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	45		2.0		53.0	100
Cel przedmiotu	Zapoznanie z metodami symulacyjnymi stosowanymi w modelowaniu nanomateriałów i nanostruktur, w szczególności z dynamiką molekularną oraz statyką molekularną. Przedmiot obejmuje praktyczne (zobrazowane licznymi przykładami i ćwiczeniami) poznanie stosowanych podejść symulacyjnych oraz naukę obsługi profesjonalnego oprogramowania naukowego (programy VMD, gnuplot, LAMMPS, Ovito), jak również poznanie sposobów jego wykorzystania.						

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 potrafi posługiwać się profesjonalnym oprogramowaniem naukowym, wykorzystywanym do prowadzenia symulacji atomistycznych.	[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi
	[K7_W05] posiada pogłębioną znajomość metod matematycznych, numerycznych i symulacyjnych, klasycznych i kwantowych, stosowanych przy modelowaniu nanostruktur	Student zna metodę dynamiki molekularnej i dogłębnie rozumie zasadę jej działania. Student jest także świadom zalet i ograniczeń tej metody.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW3] Ocena wiedzy zawartej w opracowaniu tekstowym i projektowym
	[K7_U02] posiada pogłębione umiejętności w zakresie projektowania nanomateriałów oraz prowadzenia pracy laboratoryjnej związanej z wytwarzaniem i badaniem nanostruktur	Student potrafi zastosować metodę dynamiki molekularnej w modelowaniu zachowania różnych nanomateriałów i nanostruktur, oraz przewidywaniu ich właściwości.	[SU1] Ocena realizacji zadania
	[K7_U05] potrafi planować i przeprowadzać obliczenia teoretyczne, numeryczne i symulacje zjawisk i procesów, krytycznie analizować ich wyniki, wyciągać wnioski i formułować umotywowane opinie z nanotechnologii oraz pokrewnych nauk ścisłych i przyrodniczych	Student potrafi zaplanować i przeprowadzić symulacje pozwalające zbadać nanomateriał/zjawisko. Student potrafi przeanalizować wyniki symulacji oraz krytycznie na nie spojrzeć, oceniając ich poprawność oraz adekwatność zastosowanego podejścia symulacyjnego. Student potrafi skonfrontować przewidywania uzyskane na podstawie symulacji z rzeczywistością oraz zaproponować sposoby poprawy użytego podejścia/modelu.	[SU1] Ocena realizacji zadania [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania
Treści przedmiotu	Treści przedmiotu - laboratoria 1) Definiowanie i wizualizowanie układów atomowych. 2) Zapoznanie z programem VMD. 3) Przygotowanie, przeprowadzenie oraz analiza rezultatów symulacji MD. 4) Zapoznanie z programem LAMMPS. 5) Opracowanie i prezentacja wyników symulacji. 6) Zapoznanie z programem gnuplot. 7) Praca nad przykładowymi problemami, obejmującymi wykorzystanie symulacji MD w modelowaniu nanomateriałów i nanostruktur, w tym grafenu i struktur grafenopodobnych, fulerenów oraz nanocząstek. 8) Poznanie podejść symulacyjnych stosowanych w badaniu różnych właściwości, m. in. właściwości strukturalnych (parametry strukturalne), mechanicznych (moduły mechaniczne, stałe sprężystości), transportowych (wsp. dyfuzji, lepkość), termodynamicznych (ciepło właściwe, wsp. przewodnictwa cieplnego, temperatura topnienia).		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Student jest zaznajomiony z mechaniką klasyczną, termodynamiką oraz nauką o materiałach.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa oceny końcowej
	testy pisemne sprawdzające niezbędną wiedzę teoretyczną	50.0%	10.0%
	zadania praktyczne sprawdzające niezbędne umiejętności praktyczne	50.0%	20.0%
	praca nad zadaniami/projektem	50.0%	50.0%
	sprawozdania z zrealizowanych zadań/projektu	50.0%	20.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	1. S. Pal, K.V. Reddy, Molecular Dynamics for Materials Modeling: A Practical Approach Using LAMMPS Platform, CRC Press, 2025. 2. D.C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cambridge University Press, 2004. 3. D. Frenkel, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001. 4. LAMMPS Documentation, https://docs.lammps.org/Manual.html 5. OVITO User Manual, https://www.ovito.org/docs/current/ 6. Gnuplot User Manual, http://www.gnuplot.info/docs_6.0/Gnuplot_6.pdf	

	Uzupełniająca lista lektur	1. V. Bulatov, W. Cai, Computer simulations of dislocations, Oxford University Press, 2006. 2. M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1989.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	1) Określenie struktury równowagowej wybranej struktury grafenopodobnej przy wykorzystaniu metody statyki molekularnej i metod minimalizacji energii. 2) Wyznaczenie dla wybranej struktury grafenopodobnej stałych sprężystości na bazie statyki molekularnej i metody bezpośredniej. 3) Wyznaczenie równania stanu nanomateriału oraz powiązanych z nim właściwości. 4) Określenie na podstawie symulacji MD temperatury topnienia wybranego nanomateriału. 5) Wyznaczenie na podstawie symulacji MD temperaturowej zależności współczynnika dyfuzji w wybranym nanomateriale. 6) Wyznaczenie na podstawie symulacji MD ciepła właściwego wybranego nanomateriału. 7) Wyznaczenie na podstawie symulacji MD przewodnictwa cieplnego grafenu.	
Zajęcia praktyczne w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	

Dokument wygenerowany elektronicznie. Nie wymaga pieczęci ani podpisu.