



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Modelowanie i symulacje molekularne

Przedmiot

Kierunek studiów

Fizyka Techniczna

Studia w zakresie (specjalność)

Poziom studiów

pierwszego stopnia

Forma studiów

stacjonarne

Rok/semestr

III/5

Profil studiów

ogólnoakademicki

Język oferowanego przedmiotu

polski

Wymagalność

obieralny

Liczba godzin

Wykład

30

Ćwiczenia

Laboratoria

30

Projekty/seminaria

Inne (np. online)

Liczba punktów ECTS

5

Wykładowcy

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

dr hab. Arkadiusz Ptak, prof. PP

arkadiusz.ptak@put.poznan.pl

tel. 61 665 3233

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Technicznej

Odpowiedzialny za przedmiot/wykładowca:

Wymagania wstępne

Wiedza z fizyki kwantowej i klasycznej w zakresie wykładanym na kierunku "fizyka techniczna".

Umiejętność rozwiązywania prostych problemów fizycznych w oparciu o posiadaną wiedzę, umiejętność pozyskiwania informacji ze wskazanych źródeł. Zrozumienie konieczności poszerzania swoich kompetencji, gotowość do podjęcia współpracy w ramach zespołu.

Cel przedmiotu

1. Przekazanie studentom podstawowej wiedzy i umiejętności w zakresie modelowania i symulacji molekularnych.

2. Rozwijanie u studentów umiejętności analizy jakościowej i ilościowej zjawisk fizycznych zachodzących na poziomie molekularnym, z wykorzystaniem symulacji komputerowych.



Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza

Student zna i rozumie:

- 1) podstawowe zasady modelowania molekularnego wykorzystującego prawa fizyki klasycznej [K1_W01];
- 2) podstawowe metody modelowania molekularnego wykorzystujące zasady fizyki kwantowej, w tym metody chemii kwantowej ("ab initio" oraz półempiryczne) oraz metody, których podstawą jest teoria funkcjonału gęstości elektronowej (DFT) [K1_W04];
- 3) metodologię symulacji dynamiki molekularnej [K1_W01].

Umiejętności

Student potrafi:

- 1) poprawnie wykorzystać standardowe narzędzia analityczne, w tym numeryczne i obliczeniowe, do rozwiązywania szczegółowych problemów fizycznych i technicznych; potrafi krytycznie ocenić wyniki takiej analizy [K1_U09];
- 2) przeprowadzić modelowanie i symulacje molekularne z wykorzystaniem standardowego oprogramowania wykorzystującego metody fizyki klasycznej i kwantowej [K1_U19];
- 3) wybrać metodę modelowania molekularnego do rozwiązania problemu fizycznego, a także ustalić niezbędne zasoby komputerowe do wykonania zadania obliczeniowego [K1_U02, K1_U09, K1_U14].

Kompetencje społeczne

Student zdobywa kompetencje pozwalające na:

- 1) odpowiedzialną pracę nad wyznaczonym zadaniem, zarówno samodzielnie, jak i w zespole, przyjmując w nim różne role [K1_K01];
- 2) zrozumienie potrzeby i ustalenie możliwości ciągłego doksztalcania się w celu podnoszenia kompetencji zawodowych i społecznych [K1_K03].

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Efekt kształcenia (symbol)	Metoda weryfikacji	Kryteria oceny
----------------------------	--------------------	----------------

Wykład:

W01, W04, U09, K01, K03	test z pytaniami zamkniętymi i otwartymi	3: 50.1%-70.0%
		4: 70.1%-90.0%
		5: od 90.1%

Laboratorium:



U09, U14, U19, K01, K03	ocena aktywności w laboratorium, sprawozdania	3: 50.1%-70.0%
		4: 70.1%-90.0%
		5: od 90.1%

Treści programowe

1. Wprowadzenie do modelowania i symulacji komputerowych, w szczególności molekularnych.
2. Modelowanie molekularne; rodzaje modeli i ich otoczenia, rodzaje obliczeń.
3. Modele klasyczne cząsteczek; idea pola siłowego.
4. Modele kwantowe cząsteczek; konstrukcja i rozwiązywanie równania Schroedingera; równanie Kohna-Shama.
5. Algorytmy optymalizacji geometrii cząsteczek.
6. Symulacje: dynamika molekularna, dynamika Langevina, metoda Monte-Carlo.
7. Dokowanie molekularne jako element komputerowo wspomaganego projektowanie leków.

Metody dydaktyczne

1. Wykład konwersatoryjny: prezentacja multimedialna, pokazy symulacji.
2. Ćwiczenia laboratoryjne: przeprowadzanie modelowania i symulacji komputerowych, indywidualne projekty, dyskusja, praca w zespołach.

Literatura

Podstawowa

1. Materiały z wykładów (po polsku)
2. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications, D. Frenkel, B. Smit, Academic Press

Uzupełniająca

1. Molecular Modeling Techniques in Material Sciences, J.-R. Hill, L. Subramanian, A. Maiti, Taylor&Francis 2005
2. Molecular Modeling and Simulation. An Interdisciplinary Guide, T. Schlick, 2nd edition, Springer 2010
3. <http://www.molnet.eu> (po polsku)



Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	125	5,0
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	65	
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych, przygotowanie do testów/egzaminu, wykonanie projektów) ¹	60	

¹ niepotrzebne skreślić lub dopisać inne czynności