



## KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Modelowanie i symulacje molekularne [S1FT2>MiSM]

### Przedmiot

Kierunek studiów  
Fizyka techniczna

Rok/Semestr  
3/5

Studia w zakresie (specjalność)

Profil studiów  
ogólnoakademicki

Poziom studiów  
pierwszego stopnia

Język oferowanego przedmiotu  
polski

Forma studiów  
stacjonarne

Wymagalność  
obieralny

### Liczba godzin

Wykład  
30

Laboratorium  
30

Inne (np. online)  
0

Ćwiczenia  
0

Projekty/seminaria  
0

### Liczba punktów ECTS

4,00

### Koordynatorzy

dr hab. Arkadiusz Ptak prof. PP  
arkadiusz.ptak@put.poznan.pl

### Wykładowcy

### 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
- 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)  
3) metodologię symulacji dynamiki molekularnej

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
- 2) przeprowadzić modelowanie i symulacje molekularne z wykorzystaniem standardowego oprogramowania wykorzystującego metody fizyki klasycznej i kwantowej
- 3) wybrać metodę modelowania molekularnego do rozwiązania problemu fizycznego, a także ustalić niezbędne zasoby komputerowe do wykonania zadania obliczeniowego

Kompetencje społeczne:

Student zdobywa kompetencje pozwalające na:

- 1) odpowiedzialną pracę nad wyznaczonym zadaniem, zarówno samodzielnie, jak i w zespole, przyjmując w nim różne role
- 2) zrozumienie potrzeby i ustalenie możliwości ciągłego doskonalenia się w celu podnoszenia kompetencji zawodowych i społecznych

### Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

Metoda weryfikacji Kryteria oceny

Wykład:

est z pytaniami zamkniętymi i otwartymi 3: 50.1%-70.0%

4: 70.1%-90.0%

5: od 90.1%

Laboratorium:

ocena aktywności w laboratorium, sprawozdania 3: 50.1%-70.0%

4: 70.1%-90.0%

5: od 90.1%

### Treści programowe

Podstawy modelowania i symulacji komputerowych w skali atomowej, obejmujące tworzenie modeli molekularnych kwantowych i klasycznych, symulacje dynamiki molekularnej oraz dokowanie molekularne.

### Tematyka zajęć

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 Schrodingera; 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	100	4,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	60	2,50
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwium/egzaminu, wykonanie projektu)	40	1,50