



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

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