



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Zaawansowane laboratorium modelowania materiałów [S2FT2>ZLMM]

Przedmiot

Kierunek studiów
Fizyka techniczna

Rok/Semestr
1/1

Studia w zakresie (specjalność)
–

Profil studiów
ogólnoakademicki

Poziom studiów
drugiego stopnia

Język oferowanego przedmiotu
polski

Forma studiów
stacjonarne

Wymagalność
obligatoryjny

Liczba godzin

Wykład
0

Laboratorium
15

Inne
0

Ćwiczenia
0

Projekty/seminaria
0

Liczba punktów ECTS

1,00

Koordynatorzy

dr inż. Maciej Szary
maciej.szary@put.poznan.pl

Wykładowcy

Wymagania wstępne

Wiedza z fizyki kwantowej i ciała stałego, termodynamiki oraz chemii, niezbędna do zrozumienia i analizy podstawowych właściwości materiałów oraz procesów fizykochemicznych na ich powierzchniach. Znajomość podstawowych metod modelowania materiałów. Umiejętność rozwiązywania prostych problemów w oparciu o posiadaną wiedzę i umiejętność pozyskiwania informacji ze wskazanych źródeł. Umiejętność opracowania, udokumentowania przedstawienia zagadnień z zakresu fizyki.

Cel przedmiotu

1. Przekazanie studentom wiedzy i umiejętności w zakresie modelowania materiałów oraz symulacji procesów fizycznych pozwalającą na opis wybranych właściwości materiałów oraz oddziaływań na ich powierzchniach. 2. Rozwijanie u studentów umiejętności analizy jakościowej i ilościowej procesów fizycznych zachodzących na poziomie atomowym (tworzenie wiązań chemicznych, adsorpcja, interkalacja itp.), z wykorzystaniem wybranych metod modelowania materiałów. 3. Pogłębienie wiedzy na temat powiązania pomiędzy strukturą i właściwościami materiałów nieorganicznych.

Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza:

Student zna i rozumie:

1. praktyczne aspekty wybranych metod modelowania i symulacji materiałów,
2. właściwości materiałów dostępne w wybranych metodach obliczeniowych,
3. ograniczenia wybranych metod modelowania materiałów,
4. powiązanie pomiędzy strukturą i właściwościami materiałów.

Umiejętności:

Student potrafi:

1. wykorzystać standardowe narzędzia do modelowania i symulacji materiałów oraz uzyskać kluczowych dla badanego systemu właściwości.
2. rozpoznać typy oddziaływań między elementami modelowanej struktury oraz opisać ich wpływ na właściwości materiału.
3. poprawnie wykorzystać standardowe narzędzia analityczne do rozwiązywania szczegółowych problemów fizycznych; potrafi krytycznie ocenić wyniki takiej analizy,
4. wybrać odpowiednią metodę modelowania i symulacji do poprawnego opisu materiałów i procesów fizycznych, a także ustalić niezbędne zasoby komputerowe do wykonania potrzebnych obliczeń.

Kompetencje społeczne:

W ramach nabytych kompetencji student:

1. potrafi odpowiedzialnie pracować nad wyznaczonym zadaniem samodzielnie oraz w zespole, przyjmując w nim różne role
2. rozumie potrzebę i zna możliwości ciągłego doskonalenia się - podnoszenie kompetencji zawodowych, osobistych i społecznych

Metody weryfikacji efektów uczenia się i kryteria oceny

Efekty uczenia się przedstawione wyżej weryfikowane są w następujący sposób:

W zakresie stosowanych metod weryfikacji osiągniętych efektów uczenia się stosuje się następujące progi ocen:

- 50,1-60% dst;
- 60,1-70% dst+;
- 70,1-80% db;
- 80,1-90% db+;
- od 90,1% bdb.

Ocena wyniku z przygotowania protokołu z pomiarów laboratoryjnych oraz/lub odpowiedzi ustnej.

Treści programowe

Modelowanie właściwości materiałów w skali atomowej na bazie wybranych metod modelowania i symulacji materiałów. Opis wybranych zagadnień z chemii kwantowej i fizyki ciała stałego, fizykochemii powierzchni oraz termodynamiki z użyciem wybranych metod obliczeniowych. Relacja między strukturą i właściwościami materiałów.

Tematyka zajęć

1. Praktyczne aspekty modelowania i symulacji z wykorzystaniem wybranych metod obliczeniowych.
2. Tworzenie modeli badanych materiałów.
3. Modelowanie wybranych właściwości materiałów.
4. Symulacje wybranych procesów fizycznych.
5. Oddziaływania w materiałach, analiza ilościowa i jakościowa.
6. Analiza relacji między właściwościami materiału a jego strukturą.

Metody dydaktyczne

Przeprowadzanie modelowania i symulacji komputerowych, projekty obejmujące wykonanie niezbędnych obliczeń, opracowanie i interpretację wyników oraz ich prezentację, dyskusję, oraz praca w zespołach.

Literatura

Podstawowa:

1. Materiały z zajęć (po polsku)
2. Materials Modelling using Density Functional Theory, Giustino Feliciano, Oxford University Press

Uzupełniająca:

1. A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wolfram Koch, Max C. Holthausen, Wiley

Bilans nakładu pracy przeciętnego studenta

	Godzin	ECTS
Łączny nakład pracy	30	1,00
Zajęcia wymagające bezpośredniego kontaktu z nauczycielem	15	0,50
Praca własna studenta (studia literaturowe, przygotowanie do zajęć laboratoryjnych/ćwiczeń, przygotowanie do kolokwium/egzaminu, wykonanie projektu)	15	0,50