



KARTA OPISU PRZEDMIOTU - SYLABUS

Nazwa przedmiotu

Modelowanie komputerowe materiałów w skali atomowej [S1FT2>MKMwSA]

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 komputerowego materiałów, w szczególności cząsteczek i nanocząstek, w skali atomowej. 2. Rozwijanie u studentów umiejętności analizy jakościowej i ilościowej zjawisk fizycznych, zachodzących na poziomie molekularnym i atomowym, w oparciu o symulacje komputerowe.

Przedmiotowe efekty uczenia się

Wiedza:

1. Student zna i rozumie podstawowe zasady modelowania molekularnego wykorzystującego prawa fizyki klasycznej

2. Student zna i rozumie podstawowe metody modelowania w skali atomowej wykorzystującego idee

fizyki kwantowej, w tym metody z pierwszych zasad, metody półempiryczne oraz metody DFT (czyli oparte na teorii funkcjonału gęstości elektronowej)

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 komputerowe z wykorzystaniem standardowego oprogramowania wykorzystującego metody klasyczne i kwantowe
3. wybrać metodę modelowania 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:

cena aktywności w laboratorium, raport 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 klasycznych i kwantowych, optymalizację geometrii, symulacje dynamiki molekularnej oraz dokowanie molekularne.

Tematyka zajęć

1. Wprowadzenie do modelowania i symulacji komputerowych materiałów.
2. Modelowanie w skali atomowej: rodzaje modeli i ich otoczenia, rodzaje obliczeń.
3. Modele klasyczne cząsteczek i struktur; idea pola siłowego.
4. Modele kwantowe cząsteczek i struktur:
 - a) metody chemii kwantowej: ab-initio i półempiryczne;
 - b) metody oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT) - twierdzenia Hohenberga-Kohna, równanie Kohna-Shama.
5. Porównanie modeli klasycznych i kwantowych.
6. Algorytmy optymalizacji geometrii modeli.
7. Symulacje dynamiki molekularnej.
8. Elementy komputerowo wspomaganego projektowania leków - dokowanie ligandów.

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