



Modelowanie molekularne w nauce o materiałach i chemii

Karta opisu przedmiotu

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Nanoinżynieria Materiałów Specjalność Wszystkie Jednostka organizacyjna Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki Poziom kształcenia Studia magisterskie inżynierskie II stopnia Forma studiów Stacjonarne Profil studiów Ogólnoakademicki		Cykl dydaktyczny 2023/2024 Kod przedmiotu CNAICS.IIi1.15836.23 Języki wykładowe polski Obligatoryjność Obowiązkowy Blok zajęciowy Przedmioty specjalnościowe Przedmiot powiązany z badaniami naukowymi Tak
Koordynator przedmiotu	Paweł Stoch	
Prowadzący zajęcia	Paweł Stoch, Andrzej Mikuła, Witold Jastrzębski, Andrzej Koleżyński	
Okres Semestr 1	Forma zaliczenia Zaliczenie Forma prowadzenia i godziny zajęć Wykład: 30 Ćwiczenia laboratoryjne: 30 Ćwiczenia projektowe: 30	Liczba punktów ECTS 7

Cele kształcenia dla przedmiotu

C1	Zapoznanie studentów z metodami modelowania molekularnego stosowanymi w chemii oraz nauce o materiałach.
C2	Zapoznanie studentów z klasyczną i kwantową dynamiką molekularną oraz metodami chemii kwantowej
C3	Zapoznanie studentów z wykorzystaniem powyższych metod do określania i przewidywania wybranych właściwości materiałów (strukturalnych, termicznych, mechanicznych, oscylacyjnych).

Efekty uczenia się dla przedmiotu

Kod	Efekty w zakresie	Kierunkowe efekty uczenia się	Metody weryfikacji
Wiedzy - Student zna i rozumie:			
W1	prawa fizyki i chemii wykorzystywane w omawianych metodach symulacyjnych	NAIC2A_W01, NAIC2A_W02, NAIC2A_W03	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
W2	możliwości i ograniczenia omawianych metod symulacyjnych	NAIC2A_W01, NAIC2A_W02, NAIC2A_W03	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
W3	podstawy programów służących do prowadzenia symulacji oraz przygotowania i prezentacji danych	NAIC2A_W01, NAIC2A_W02, NAIC2A_W03	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
Umiejętności - Student potrafi:			
U1	dobierać odpowiedni rodzaj symulacji do rozwiązania określonego problemu	NAIC2A_U02	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
U2	zebrać oraz przygotować odpowiedni zbiór danych do przeprowadzenia symulacji	NAIC2A_U01, NAIC2A_U02	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
U3	przeprowadzić krytyczną analizę otrzymanych wyników symulacji oraz porównać je z rzeczywistymi właściwościami materiałów	NAIC2A_U01, NAIC2A_U02	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
U4	samodzielnie wyszukać informacje w czasopismach naukowych i popularnonaukowych oraz chemicznych bazach danych w języku polskim i angielskim	NAIC2A_U01	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
Kompetencji społecznych - Student jest gotów do:			

Kod	Efekty w zakresie	Kierunkowe efekty uczenia się	Metody weryfikacji
K1	aktywnego poszerzania wiedzy oraz umiejętności	NAIC2A_K01, NAIC2A_K02	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium
K2	kreatywnej analizy zależności pomiędzy zjawiskami i poprawnego wyciągania wniosków	NAIC2A_K01, NAIC2A_K02	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna, Zaliczenie laboratorium

Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

W trakcie zajęć student zostaje zaznajomiony z metodami modelowania molekularnego stosowanymi w chemii oraz nauce o materiałach. W ramach zajęć słuchacze zostaną zapoznani z klasyczną i ab initio dynamiką molekularną oraz metodami stosowanymi w chemii kwantowej. Dodatkowy nacisk zostanie położony na wykorzystanie powyższych metod do określania i przewidywania wybranych właściwości materiałów (strukturalnych, termicznych, mechanicznych, oscylacyjnych).

Nakład pracy studenta

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane aktywności
Wykład	30
Ćwiczenia laboratoryjne	30
Ćwiczenia projektowe	30
Dodatkowe godziny kontaktowe	5
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	25
Przygotowanie do zajęć	25
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2
Przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania	28
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 175
Liczba godzin kontaktowych	Liczba godzin 90

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Treści programowe

Lp.	Treści programowe	Efekty uczenia się dla przedmiotu	Formy prowadzenia zajęć
1.	1. Mechanika molekularna - podstawy klasycznej dynamiki molekularnej - schematy NVE, NVT, NPT - konstrukcja pola sił, typy potencjałów, parametryzacja - zastosowanie uczenia maszynowego w dynamice molekularnej - wyznaczanie współczynników dyfuzji - symulacje struktury materiałów krystalicznych i amorficznych, radialna i kątowna funkcja rozkładu, analiza lokalnego uporządkowania, defekty - symulacje właściwości termicznych materiałów - symulacje właściwości mechanicznych (stałe elastyczne) - teoretyczne widma oscylacyjne cząsteczek - modelowanie reakcji chemicznych z zastosowaniem potencjałów ReaxFF 2. Metody chemii kwantowej - metoda Hartree-Fock'a, metody mieszania konfiguracji, metody perturbacyjne, metoda sprzężonych klasterów, funkcje bazowe, teoria funkcjonału gęstości, funkcjonały korelacyjno-wymienne (LDA, GGA, meta-GGA itp.) - optymalizacja geometrii cząsteczek - stany przejściowe i ścieżki reakcji - drgania molekuł - rzędowość wiązań chemicznych - orbitale HOMO/LUMO - modele ciągłego otoczenia 3. Dynamika molekularna ab initio - metoda pseudopotencjałów, dynamika molekularna BO, CPMD - optymalizacja geometrii cząsteczek, materiałów krystalicznych i amorficznych - analiza rzędowości wiązań chemicznych do opisu lokalnego uporządkowania - wyznaczanie punktów krytycznych wiązań chemicznych - stany przejściowe i ścieżki reakcji - przygotowanie danych uczących do trenowania potencjałów (Machine Learning)	W1, W2, W3, U1, U4, K1, K2	Wykład

Lp.	Treści programowe	Efekty uczenia się dla przedmiotu	Formy prowadzenia zajęć
2.	Zapoznanie studentów z obsługą, używaniem i możliwościami poszczególnych programów stosowanych w trakcie zajęć (ASE, LAMMPS, GULP, ORCA, CP2K, CPMD). Przygotowanie danych wejściowych oraz analiza uzyskanych wyników. Praktyczne zaznajomienie z tematyką wykładu	W1, W2, W3, U1, U2, U3, U4, K1, K2	Ćwiczenia laboratoryjne
3.	Wykonanie przez studentów większych projektów obliczeniowych bazujących na zdobytej wiedzy na wykładzie i laboratorium. Przykładowe tematy projektów: - wyznaczanie współczynników dyfuzji w ciałach stałych - określanie struktury materiałów amorficznych - porównanie wyników klasycznej i kwantowej dynamiki molekularnej - optymalizacja potencjałów oddziaływań międzyatomowych - symulacje widm oscylacyjnych cząsteczek - symulacje procesu hydratacji	W1, W2, W3, U1, U2, U3, U4, K1, K2	Ćwiczenia projektowe

Informacje rozszerzone

Metody i techniki kształcenia :

Metoda projektowa (ang. Project Based Learning), Metoda problemowa (ang. Problem Based Learning), Praca grupowa, Dyskusja, Mini wykład

Rodzaj zajęć	Metody zaliczenia	Warunki zaliczenia przedmiotu
Wykład	Aktywność na zajęciach, Zaliczenie laboratorium	Warunkiem uzyskania zaliczenia przedmiotu jest zaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych oraz projektowych.
Ćwiczenia laboratoryjne	Aktywność na zajęciach, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Sprawozdanie, Odpowiedź ustna	Warunkiem uzyskania zaliczenia z laboratorium jest wykonanie wszystkich przewidzianych w harmonogramie ćwiczeń oraz oddanie wszystkich sprawozdań, ocenionych na ocenę pozytywną. Każde sprawozdanie oddać należy na kolejnych realizowanych zajęciach (nieuzasadnione oddanie sprawozdania w późniejszym czasie skutkuje obniżeniem oceny). Ocena uzyskana za sprawdzanie nie podlega poprawie (wyjątkiem jest uzyskanie oceny niedostatecznej) i negocjacji w celu jej podwyższenia. Ocenę stanowić będzie średnia arytmetyczna ocen ze sprawozdań. Dopuszczone są dwie usprawiedliwione nieobecności.
Ćwiczenia projektowe	Aktywność na zajęciach, Wykonanie projektu, Odpowiedź ustna	Warunkiem uzyskania zaliczenia z projektu jest wykonanie wszystkich przewidzianych projektów oraz zaliczenie ich na ocenę pozytywną. Ocenę końcową z projektu stanowić będzie średnia arytmetyczna ocen ze poszczególnych projektów.

Warunki i sposób zaliczenia poszczególnych form zajęć, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu

Warunkiem uzyskania zaliczenia końcowego jest wykonanie wszystkich przewidzianych w harmonogramie ćwiczeń laboratoryjnych oraz projektowych i oddanie wszystkich sprawozdań/projektów, ocenionych na ocenę pozytywną. Każde

sprawozdanie/projekt oddać należy na kolejnych realizowanych zajęciach (nieuzasadnione oddanie sprawozdania w późniejszym czasie skutkuje obniżeniem oceny) lub we wskazanym przez prowadzącego terminie. Ocena uzyskana za sprawdzanie/projekt nie podlega poprawie (wyjątkiem jest uzyskanie oceny niedostatecznej) i negocjacom w celu jej podwyższenia. Ocenę stanowić będzie średnia arytmetyczna ocen ze sprawozdań/projektów.

Sposób obliczania oceny końcowej

Ocena końcowa jest średnią arytmetyczną oceny z ćwiczeń laboratoryjnych oraz projektowych

Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach

Ustalany indywidualnie.

Wymagania wstępne i dodatkowe

Podstawowa wiedza z zakresu fizyki lub chemii ciała stałego.

Zasady udziału w poszczególnych zajęciach, ze wskazaniem, czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa

Wykład: Studenci uczestniczą w zajęciach poznając kolejne treści nauczania zgodnie z sylabusem przedmiotu. Studenci winni na bieżąco zadawać pytania i wyjaśniać wątpliwości. Rejestracja audiowizualna wykładu wymaga zgody prowadzącego.

Ćwiczenia laboratoryjne: Studenci wykonują ćwiczenia laboratoryjne zgodnie z materiałami udostępnionymi przez prowadzącego. Student jest zobowiązany do przygotowania się w przedmiocie wykonywanego ćwiczenia, co może zostać zweryfikowane kolokwium w formie ustnej lub pisemnej. Obecność na ćwiczeniach laboratoryjnych jest obowiązkowa.

Dopuszczone są dwie usprawiedliwione nieobecności.

Ćwiczenia projektowe: Studenci wykonują wskazany przez prowadzącego projekt. Stopień przygotowania do zajęć może zostać zweryfikowany kolokwium ustnym lub pisemnym. Zaliczenie zajęć odbywa się na podstawie zaprezentowania rozwiązania postawionego problemu. Obecność na zajęciach projektowych jest obowiązkowa.

Zaliczenie modułu jest możliwe po zaliczeniu wszystkich zajęć laboratoryjnych i projektowych.

Obecność na zajęciach laboratoryjnych i projektowych jest obowiązkowa.

Literatura

Obowiązkowa

1. Alan Hinchliffe, Molecular Modelling for Beginners, John Wiley & Sons Ltd, 2003
2. Perla B. Balbuena, Jorge M. Seminario, Molecular Dynamics From Classical to Quantum Methods, Elsevier, 1999
3. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 2nd ed., Wiley, 2006.

Dodatkowa

1. Dominik Markx, Jurgen Hutter, AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS: BASIC THEORY AND ADVANCED METHODS, Cambridge University Press, 2009

Badania i publikacje

Badania

1. Optymalizacja struktury materiałów krystalicznych i amorficznych.
2. Przewidywanie właściwości nowych materiałów.
3. Symulacje uszkodzeń radiacyjnych.
4. Modelowanie teoretycznych widm spektroskopowych.

Publikacje

1. Paweł GOJ, Bartosz HANDKE, Paweł STOCH, Vibrational characteristics of aluminum-phosphate compounds by an experimental and theoretical approach, Scientific Reports, 12(2022)17495
2. Sylwia CUKROWICZ, Paweł GOJ, Paweł STOCH, Artur BOBROWSKI, Bożena Tylińczak, Beata GRABOWSKA, Molecular dynamic (MD) simulations of organic modified montmorillonite, Applied Sciences (Basel) 12(2022)314.

3. Paweł GOJ, Aleksandra WAJDA, Paweł STOCH, Development of a new parameterization to describe the influence of SrO on iron-phosphate glass structural properties using molecular dynamics simulations, *Materials*, 14(2021)4326
4. Paweł GOJ, Paweł STOCH, Influence of CaO on structural features of polyphosphate glasses by molecular dynamics simulations, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 537(2020)120014

Kierunkowe efekty uczenia się

Kod	Treść
NAIC2A_K01	Absolwent ma świadomość konieczności ciągłego dokształcania się i podnoszenia swoich kwalifikacji zawodowych i społecznych. Jest gotów zrozumiale przekazywać wiedzę i jasno wyrażać opinie w wybranej dziedzinie
NAIC2A_K02	Absolwent jest gotów do kreatywnego i przedsiębiorczego działania, z pełną świadomością odpowiedzialności w realizacji projektów samodzielnych, jak i grupowych. Posiada umiejętności kierowania zespołem
NAIC2A_U01	Absolwent potrafi korzystać z zasobów istniejącej wiedzy w postaci literaturowej, baz danych lub innych właściwie dobranych źródeł. Potrafi na podstawie uzyskanych informacji dokonać analizy oraz interpretacji, zakończonej uzasadnionymi wnioskami i oceną krytyczną
NAIC2A_U02	Absolwent potrafi samodzielnie bądź w grupie dokonać właściwego doboru metod i narzędzi niezbędnych w rozwiązywaniu zadań z dziedziny inżynierii materiałowej, opierając się na optymalnym doborze narzędzi informatycznych, materiałów i procesów wytwórczych typowych dla nanotechnologii. Posiada umiejętność krytycznej oceny zaproponowanych lub istniejących rozwiązań biorąc pod uwagę także czynniki pozatechniczne
NAIC2A_W01	Absolwent posiada pogłębioną wiedzę w dziedzinie nauk podstawowych takich jak chemia i fizyka. Dzięki pozyskanej wiedzy posiada zrozumienie efektów i zjawisk powiązanych z nanotechnologią, oraz sposobów badania i możliwych zastosowań nanomateriałów
NAIC2A_W02	Absolwent posiada pogłębioną wiedzę z zakresu metod numerycznych, jak i narzędzi obliczeniowych stanowiących podstawę modelowania procesów i analizy wyników eksperymentalnych niezbędnych w projektowaniu nanomateriałów
NAIC2A_W03	Absolwent posiada pogłębioną wiedzę o teoretycznej stronie inżynierii materiałowej powiązanej z nanomateriałami oraz posiada poszerzoną wiedzę w dziedzinie projektowania złożonej struktury i właściwości użytkowych nanomateriałów