



Modelowanie molekularne w nauce o materiałach

Karta opisu przedmiotu

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Inżynieria Materiałowa Specjalność Wszystkie Jednostka organizacyjna Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki Poziom kształcenia Studia magisterskie II stopnia Forma studiów Stacjonarne Profil studiów Ogólnoakademicki		Cykl dydaktyczny 2023/2024 Kod przedmiotu CIMAS.II2.15910.23 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	
Okres Semestr 2	Forma zaliczenia Egzamin Forma prowadzenia i godziny zajęć Wykład: 15 Zajęcia warsztatowe: 30	Liczba punktów ECTS 4

Cele kształcenia dla przedmiotu

C1	Zapoznanie studentów z metodami modelowania molekularnego stosowanymi w 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, transportowych, 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	IMT2A_W01, IMT2A_W01_0, IMT2A_W02	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Egzamin, Sprawozdanie
W2	możliwości i ograniczenia omawianych metod symulacyjnych	IMT2A_W01, IMT2A_W01_0	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Egzamin, Sprawozdanie
W3	podstawy programów służących do prowadzenia symulacji oraz przygotowania i prezentacji danych	IMT2A_W01, IMT2A_W01_0, IMT2A_W02	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Egzamin, Sprawozdanie
Umiejętności - Student potrafi:			
U1	dobrać odpowiedni rodzaj symulacji do rozwiązania określonego problemu	IMT2A_U01, IMT2A_U02, IMT2A_U04	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Egzamin, Sprawozdanie
U2	zebrać oraz przygotować odpowiedni zbiór danych do przeprowadzenia symulacji	IMT2A_U01, IMT2A_U02, IMT2A_U04	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Sprawozdanie
U3	przeprowadzić krytyczną analizę otrzymanych wyników symulacji oraz porównać je z rzeczywistymi właściwościami materiałów	IMT2A_U01, IMT2A_U04	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Sprawozdanie
U4	samodzielnie wyszukać informacje w czasopismach naukowych i popularnonaukowych oraz chemicznych bazach danych w języku polskim i angielskim	IMT2A_U01	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Sprawozdanie
Kompetencji społecznych - Student jest gotów do:			
K1	aktywnego poszerzania wiedzy oraz umiejętności	IMT2A_K01, IMT2A_K02	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Sprawozdanie
K2	kreatywnej analizy zależności pomiędzy zjawiskami i poprawnego wyciągania wniosków	IMT2A_K01, IMT2A_K02	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Sprawozdanie

Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

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

Nakład pracy studenta

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane aktywności
Wykład	15
Zajęcia warsztatowe	30
Dodatkowe godziny kontaktowe	5
Przygotowanie do zajęć	20
Przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania	18
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	10
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 100
Liczba godzin kontaktowych	Liczba godzin 45

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Treści programowe

Lp.	Treści programowe	Efekty uczenia się dla przedmiotu	Formy prowadzenia zajęć
1.	1. Programy oraz bazy danych stosowane do przygotowania i wizualizacji wyników prowadzonych symulacji. 2. 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 3. Modelowanie molekularne ab initio - metoda Hartree-Fock'a, funkcje bazowe, teoria funkcjonału gęstości, funkcjonały korelacyjno-wymienne (LDA, GGA, meta-GGA itp.), metoda pseudopotencjałów - optymalizacja geometrii cząsteczek oraz komórek elementarnych, materiałów krystalicznych - stany przejściowe i ścieżki reakcji - drgania molekuł - obliczenia elektronowej struktury pasmowej 4. Dynamika molekularna ab initio - optymalizacja geometrii cząsteczek, materiałów krystalicznych i amorficznych - analiza rzędowości wiązań chemicznych do opisu lokalnego uporządkowania - wyznaczanie punktów krytycznych wiązań chemicznych	W1, W2, W3, 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 (LAMMPS, GULP, CP2K, CPMD, QuantumEspresso). Przygotowanie danych wejściowych oraz analiza uzyskanych wyników. Praktyczne zaznajomienie z tematyką wykładu	U1, U2, U3, U4, K1, K2	Zajęcia warsztatowe

Informacje rozszerzone

Metody i techniki kształcenia :

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

Rodzaj zajęć	Metody zaliczenia	Warunki zaliczenia przedmiotu
Wykład	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Egzamin	Warunkiem uzyskania zaliczenia jest zdanie egzaminu. Zakres egzaminu obejmował będzie tematykę poruszaną w trakcie wykładu.
Zajęcia warsztatowe	Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Sprawozdanie	Warunkiem uzyskania zaliczenia zajęć warsztatowych 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 negocjacom w celu jej podwyższania. Ocenę stanowić będzie średnia arytmetyczna ocen ze sprawozdań. Dopuszczone są dwie usprawiedliwione nieobecności.

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

Warunkiem uzyskania zaliczenia zajęć warsztatowych jest wykonanie wszystkich przewidzianych w harmonogramie zajęć i oddanie wszystkich sprawozdań ocenionych na ocenę pozytywną. Każde sprawozdanie oddać należy na kolejnych realizowanych zajęciach (nieuzasadnione oddanie sprawozdania w późniejszym czasie skutkuje obniżeniem oceny) lub we wskazanym przez prowadzącego terminie. Dopuszczone są dwie usprawiedliwione nieobecności.

Ocena uzyskana za sprawdzanie nie podlega poprawie (wyjątkiem jest uzyskanie oceny niedostatecznej) i negocjacom w celu jej podwyższania. Ocenę stanowić będzie średnia arytmetyczna ocen ze sprawozdań.

Warunkiem dopuszczenia do egzaminu jest uzyskanie zaliczenia zajęć warsztatowych.

Sposób obliczania oceny końcowej

Ocena końcowa jest średnią arytmetyczną z oceny z zajęć warsztatowych oraz egzaminu.

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.

Zajęcia warsztatowe: Studenci wykonują ćwiczenia warsztatowe 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 jest obowiązkowa.

Zaliczenie modułu jest możliwe po zaliczeniu wszystkich zajęć warsztatowych oraz zadaniu egzaminu.

Obecność na zajęciach warsztatowych 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 Tyliczszak, 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
IMT2A_K01	Ma świadomość ciągłego doskazywania się i podnoszenia swoich kwalifikacji zawodowych i społecznych. Potrafi zrozumiale przekazywać wiedzę i jasno wyrażać opinie w dziedzinie inżynieria materiałowa.
IMT2A_K02	Posiada umiejętność kreatywnego i przedsiębiorczego działania, z pełną świadomością odpowiedzialności w realizacji projektów samodzielnych, jak i grupowych, posiada umiejętności kierowania zespołem.
IMT2A_U01	Potrafi korzystać z wiedzy literaturowej oraz posiada umiejętności korzystania z baz danych i innych źródeł. Potrafi na podstawie uzyskanych informacji dokonać analizy oraz interpretacji, zakończonej uzasadnionymi wnioskami i oceną krytyczną.
IMT2A_U02	Potrafi dokonać właściwego wyboru narzędzi informatycznych w celu rozwiązania problemu technicznego.
IMT2A_U04	Potrafi dokonać właściwego doboru metod i narzędzi niezbędnych w rozwiązaniu typowych zadań z dziedziny inżynierii materiałowej, opierając się na optymalnym doborze materiałów i procesów wytwórczych.
IMT2A_W01	Ma pogłębioną i poszerzoną wiedzę w dziedzinie nauk podstawowych takich jak chemia, fizyka, matematyka itp., która jest niezbędna do rozumienia efektów i zjawisk powiązanych z wytwarzaniem, badaniem i aplikacją materiałów inżynierskich.
IMT2A_W01_0	Ma wiedzę z zakresu obsługi komputerów, podstaw programowania i technik wyszukiwania informacji oraz zna metody obliczeniowe i rozumie zasady grafiki i projektowania inżynierskiego wraz z doбором materiałów, które są niezbędne do tworzenia dokumentacji technicznej.
IMT2A_W02	Ma pogłębioną wiedzę z zakresu metod numerycznych, jak i narzędzi obliczeniowych stanowiących podstawę współczesnej analizy wyników eksperymentalnych oraz niezbędnych w projektowaniu nowych materiałów i modelowaniu procesów.