

1.	Nazwa kierunku	fizyka
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2021/2022 (semestr zimowy)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

**Moduł kształcenia:** Computer Simulations

**Kod modułu:** W4-2F-12-17

**1. Liczba punktów ECTS:** 3

2. Zakładane efekty uczenia się modułu			
kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
2F_17_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej	KF_W07	5
2F_17_2	Zna strukturę, zasadę działania i zakres wykorzystania programów symulacji dynamiki molekularnej.	KF_W07	4
2F_17_3	Potrafi określić zalety i ograniczenia metody symulacji dynamiki molekularnej.	KF_W04	4
2F_17_4	Potrafi napisać implementacje wybranych procedur i funkcji stosowanych w symulacji dynamiki molekularnej	KF_U02	4
2F_17_5	Potrafi samodzielnie przygotować opracowanie wyników badań.	KF_U11	4

**3. Opis modułu**

<b>Opis</b>	<p>Zajęcia laboratoryjne prowadzone w formie warsztatów, na których studenci zapoznają się z następującymi zagadnieniami:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Oddziaływania między-atomowe.</li> <li>-Konfiguracja początkowa, eliminacja pędu całkowitego układu, jednostki zredukowane, parametry kontrolne w etapie dochodzenia układu do stanu równowagi</li> <li>-Periodyczne warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, obcięcie sferyczne.</li> <li>-Równania ruchu Newtona dla układów atomów, metody rozwiązywania równań różniczkowych., siły i przesunięty potencjał.</li> <li>-Proste średnie termodynamiczne (energia, temperatura, ciśnienie).</li> <li>-Własności strukturalne (dwójkowa funkcja rozkładu, statyczny czynnik struktury), daleko-zasięgowe poprawki energii potencjalnej i ciśnienia.</li> <li>-Czasowe funkcje korelacji, czasy korelacji i współczynniki transportu.</li> <li>-Dynamika molekularna dla różnych zespołów statystycznych.</li> </ul> <p>Studenci dostają opis (w formie elektronicznej) zagadnień dotyczących treści zajęć, które omawiane są w trakcie zajęć.</p> <p>Poznana wiedza wykorzystana jest do opracowania programu komputerowego symulacji dynamiki molekularnej układu atomów.</p>
<b>Wymagania wstępne</b>	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej i statystycznej, znajomość języków programowania (np. Fortran, C/C++)

4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty uczenia się modułu
2F_17_w_1	Uruchomienie programów symulacji układu atomów	Podstawą zaliczenia zajęć laboratoryjnych jest znajomość metody symulacji dynamik molekularnej oraz uruchomienie programu symulacji dla układu atomów	2F_17_1, 2F_17_2, 2F_17_3, 2F_17_4, 2F_17_5
2F_17_w_2	aktywność na zajęciach	Dodatkowym czynnikiem ostatecznej oceny zaliczenia zajęć laboratoryjnych jest aktywność i samodzielność w trakcie opracowywania programów komputerowych.	2F_17_4, 2F_17_5

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów uczenia się
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
2F_17_fs_1	laboratorium	Zajęcia prowadzone w formie warsztatów: teoretyczne omówienie zagadnień symulacji dynamiki molekularnej wraz z praktycznym zastosowaniem do układu atomów.	30	lektura uzupełniająca, praca z podręcznikiem	30	2F_17_w_1, 2F_17_w_2