

1.	Nazwa kierunku	fizyka
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2022/2023 (semestr zimowy), 2023/2024 (semestr zimowy), 2024/2025 (semestr zimowy)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

**Moduł kształcenia:** Set of Diploma Courses I: Computer Simulations

**Kod modułu:** W4-2F-22-20

**1. Liczba punktów ECTS:** 3

2. Zakładane efekty uczenia się modułu			
kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
2F_20_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej	KF_W07	5
2F_20_2	Zna strukturę, zasadę działania i zakres wykorzystania programów symulacji dynamiki molekularnej.	KF_W07	4
2F_20_3	Potrafi określić zalety i ograniczenia metody symulacji dynamiki molekularnej.	KF_W04	4
2F_20_4	Potrafi napisać implementacje wybranych procedur i funkcji stosowanych w symulacji dynamiki molekularnej	KF_U02	4
2F_20_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. Poznana wiedza wykorzystana jest do opracowania programu komputerowego symulacji dynamiki molekularnej układu atomów.</p>
-------------	--

	Moduł jest opcjonalny. Studenci wybiorą dwa z czterech zaproponowanych modułów.
<b>Wymagania wstępne</b>	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej i statystycznej, znajomość języków programowania (np. Fortran, C/C++)

<b>4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu</b>			
<b>kod</b>	<b>nazwa (typ)</b>	<b>opis</b>	<b>efekty uczenia się modułu</b>
2F_20_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_20_1, 2F_20_2, 2F_20_3, 2F_20_4, 2F_20_5
2F_20_w_2	aktywność na zajęciach	Dodatkowym czynnikiem ostatecznej oceny zaliczenia zajęć laboratoryjnych jest aktywność i samodzielność w trakcie opracowywania programów komputerowych.	2F_20_4, 2F_20_5

<b>5. Rodzaje prowadzonych zajęć</b>						
<b>kod</b>	<b>rodzaj prowadzonych zajęć</b>			<b>praca własna studenta</b>		<b>sposoby weryfikacji efektów uczenia się</b>
	<b>nazwa</b>	<b>opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)</b>	<b>liczba godzin</b>	<b>opis</b>	<b>liczba godzin</b>	
2F_20_fs_1	wykład	teoretyczne podstawy symulacji dynamiki molekularnej z praktycznym zastosowaniem do układu atomów	10	lektura uzupełniająca, praca z podręcznikiem	30	2F_20_w_1, 2F_20_w_2
2F_20_fs_2	laboratorium	Zajęcia prowadzone w formie warsztatów: teoretyczne omówienie zagadnień symulacji dynamiki molekularnej wraz z praktycznym zastosowaniem do układu atomów.	20	lektura uzupełniająca, praca z podręcznikiem	30	2F_20_w_1, 2F_20_w_2