

1.	Nazwa kierunku	biofizyka
2.	Cykl rozpoczęcia	2014/2015 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia pierwszego stopnia
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Podstawy modelowania molekularnego

Kod modułu: 0305-1BF-13-11

1. Liczba punktów ECTS: 5

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
1BF_11_1	Posiada podstawową wiedzę z zakresu symulacji dynamiki molekularnej i metody Monte Carlo	KBF_W08	5
1BF_11_2	Zna podstawy dynamiki molekularnej ab initio.	KBF_W08	5
1BF_11_3	Potrafi określić zalety i ograniczenia poznanych metod symulacji komputerowych.	KBF_W08	5
1BF_11_4	Potrafi dokonać wyboru modelu oddziaływań, zespołu statystycznego oraz parametrów klasycznych symulacji odpowiednich dla analizowanego układu.	KBF_U02	4
1BF_11_5	Potrafi napisać implementacje procedur w symulacjach komputerowych.	KBF_U06	4

3. Opis modułu

Opis	<p>Na wykładzie student zapoznaje się z następującymi zagadnieniami:</p> <p>Klasyczne symulacje komputerowych:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Modele cząsteczek i potencjały oddziaływań między-molekularnych. Deterministyczne metody symulacji komputerowych – układy izolowane molekuł i układy rozciągnięte (periodyczne warunki brzegowe, konwencja najbliższych obrazów, obcięcie sferyczne, potencjał przesunięty), równania ruchu, metody rozwiązywania równań różnicowych, dynamika z więzami, oddziaływania daleko-zasięgowe, dynamika molekularna dla zespołu mikrokanonicznego, kanonicznego i izobaryczno-izotermicznego; wartości średnie i fluktuacje, wielkości termodynamiczne, czasowe funkcje korelacji, czasy korelacji oraz współczynniki transportu, własności strukturalne (dwójkowa funkcja rozkładu, statyczny czynnik struktury), daleko-zasięgowe poprawki energii potencjalnej i ciśnienia. -Stochastyczne metody symulacji komputerowych - dynamika brownowska; metoda Monte Carlo (metoda Metropolis, symulacje dla zespołu kanonicznego, izotermiczno-izobaryczna oraz dla wielkiego zespołu kanonicznego). <p>Podstawy dynamiki molekularnej ab initio</p> <ul style="list-style-type: none"> -Teoria funkcjonału gęstości
------	---

	<p>-Metoda symulacji Car-Parinella W trakcie zajęć laboratoryjnych poznana na wykładach wiedza wykorzystana jest do opracowania dwóch programów komputerowych: symulacji dynamiki molekularnej oraz Monte Carlo układu atomów.</p> <p>Laboratorium – uruchomienie programu symulacji układu atomów. Egzamin obowiązkowy</p>
Wymagania wstępne	Elementarna wiedza z zakresu mechaniki klasycznej i kwantowej, znajomość języków programowania (np. Fortran, C/C++)

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
1BF_11_w_1	Uruchomienie programów symulacji układu atomów	Podstawą zaliczenia zajęć laboratoryjnych jest uruchomienie dwóch programów symulacji (deterministycznego i stochastycznego) układów atomów.	1BF_11_1, 1BF_11_3, 1BF_11_4, 1BF_11_5
1BF_11_w_2	aktywność na zajęciach	Dodatkowym czynnikiem ostatecznej oceny zaliczenia zajęć laboratoryjnych będzie aktywność i samodzielność w trakcie opracowywania programów komputerowych.	1BF_11_1, 1BF_11_2, 1BF_11_3, 1BF_11_4, 1BF_11_5

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
1BF_11_fs_1	wykład	Wykład zagadnień przedstawionych w „Opisie modułu” z wykorzystaniem prezentacji multimedialnej.	30	Praca z podręcznikiem; lektura uzupełniająca	60	1BF_11_w_2
1BF_11_fs_2	laboratorium	Opracowanie programu komputerowego symulacji dynamiki molekularnej oraz Monte Carlo układu atomów.	30	Przyswojenie wiedzy z wykładów	30	1BF_11_w_1