

## Szablon karty przedmiotu na studiach III stopnia

Kod przedmiotu	0310008900					
Liczba przyznanych punktów ECTS	2					
Nazwa przedmiotu (PL)	Symulacje komputerowe układów molekularnych (Dynamika Molekularna, Stochastyczna, Monte Carlo w zastosowaniu do np. roztworów, polimerów, nanocząstek)					
Nazwa przedmiotu (EN)	Computer simulation of molecular systems (Molecular Dynamics, Langevine Dynamics, Monte Carlo simulations applied, e.g., to solutions, polymers, nanostructures)					
Język prowadzenia zajęć	polski					
Poziom przedmiotu (PL)	Studia trzeciego stopnia					
Poziom przedmiotu (EN)	PhD Studies					
Profil studiów (PL)	Chemia, Technologia chemiczna					
Profil studiów (EN)	Chemistry, Chemical Technology					
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny PŁ (W-3)					
Kierownik przedmiotu	Prof. dr hab. inż. Maria Hilczer					
Nazwiska pozostałych wykładowców						
Formy i metody kształcenia, liczba godzin	Wykład 5	Ćwiczenia -	Laboratorium 8	Projekt -	Seminarium 2	Inne -
Cele przedmiotu (PL)	Zapoznanie studentów z podstawami metod obliczeniowych MM (mechanika molekularna) stosowanych w naukach chemicznych. Umożliwienie nabywania umiejętności tworzenia modelu rozpatrywanej struktury molekularnej i posługiwania się wybranymi programami komputerowymi do obliczeń MM					
Cele przedmiotu (EN)	To acquaint students with basic concepts of MM (molecular mechanics) computational methods applied in chemistry. To enable students acquiring an ability to construct a considered molecular structure and to use some computer programs for MM calculations.					
Efekty kształcenia przedmiotu (PL)	Po zakończeniu kursu student potrafi: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Opisać metody obliczeniowe MM stosowane w chemii</li> <li>2. Wybrać właściwy program komputerowy dla modelowania rozpatrywanej struktury</li> <li>3. Przeprowadzić obliczenia komputerowe w oparciu o model rozpatrywanej struktury chemicznej oraz zinterpretować otrzymane wyniki</li> <li>4. W zwięzły sposób prezentować wyniki własnych obliczeń komputerowych na tle wyników znanych z literatury</li> </ol>					
Efekty kształcenia przedmiotu (EN)	After completing the course student can: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Describe the MM computational methods applied in chemistry</li> <li>2. Select computer program appropriate for computer simulation of a considered structure</li> </ol>					

	<p>3. Perform computer simulation based on the constructed model of a considered structure and discuss the results obtained</p> <p>4. Shortly present results of one's own calculations in comparison with results known from literature</p>
Metody i kryteria weryfikacji efektów kształcenia (PL)	<p>Efekty 1-2 kolokwium pisemne</p> <p>Efekty 1-3 sprawozdanie pisemne z ćwiczeń komputerowych</p> <p>Efekt 4 indywidualne prezentacje komputerowe oraz dyskusja na seminarium</p>
Metody i kryteria weryfikacji efektów kształcenia (EN)	<p>Outcomes 1-2 written test</p> <p>Outcomes 1-3 written computer lab report</p> <p>Outcome 4 individual computer presentation and discussion during seminar</p>
Wymagania wstępne (PL)	Kursy podstawowe matematyki, chemii ogólnej i nieorganicznej, chemii fizycznej, technologii informatycznych
Wymagania wstępne (EN)	Mathematics, Physical chemistry, General and Inorganic Chemistry, Information Technologies
Treści merytoryczne przedmiotu (PL)	<p>WYKŁAD</p> <p>1. Podstawy i możliwe zastosowania metod obliczeniowych:  Dynamika Molekularna  Dynamika Stochastyczna  Monte Carlo  w badaniach roztworów, polimerów i nanocząstek.</p> <p>2. Informacja o oprogramowaniu pozwalającym na stosowanie tych metod</p> <p>ĆWICZENIA LABORATORYJNE</p> <p>1. Wykonanie krótkich symulacji, mających na celu poznanie różnic między poszczególnymi metodami obliczeń, przy wykorzystaniu profesjonalnego oprogramowania</p> <p>2. Wykonanie przez każdego ze studentów projektu obliczeniowego, tzn. symulacji komputerowej wybranego układu modelowego</p> <p>SEMINARIUM</p> <p>Krótką prezentacją komputerową każdego z wykonanych projektów obliczeniowych połączoną z dyskusją w grupie studenckiej</p>
Treści merytoryczne przedmiotu (EN)	<p>LECTURE</p> <p>1. The basics and review of applications of Molecular Dynamics, Langevin Dynamics and Monte Carlo computational methods in studies on solutions, polymers or nanostructures</p> <p>2. Information about software, which implements these computational methods</p> <p>LABORATORY</p> <p>1. Computer simulations using professional software designed to indicate differences between considered computational methods</p> <p>2. Computer simulation performed by each student for a model system of individual interest</p> <p>SEMINAR</p> <p>Short computer presentation of each completed project accompanied by the discussion in the student group</p>
Forma zaliczenia (PL)	<p>Wykład : kolokwium pisemne z wykładanego materiału</p> <p>Ćwiczenia laboratoryjne: pisemne sprawozdanie z realizacji projektu obliczeniowego, zawierające uzasadnienie wyboru metody obliczeń,</p>

	<p>opis przeprowadzonej symulacji komputerowej i dyskusję wyników wraz z odniesieniami do literatury naukowej</p> <p>Seminarium: oceniany będzie sposób przygotowania prezentacji komputerowej oraz udział w dyskusji</p> <p>Ocena końcowa obejmuje kolokwium pisemne (10%), sprawozdanie z realizacji projektu (40%), prezentację komputerową (40%) i udział w dyskusji na seminarium (10%)</p>	
Forma zaliczenia (EN)	<p>Lecture: written test</p> <p>Laboratory: written report on computational project should include: the reason for selecting a particular method of calculation, description of the performed computer simulation, discussion of results obtained in comparison with results known from literature</p> <p>Seminar: quality of the computer presentation and participation in discussion will be assessed</p> <p>Final note includes written test (10%), written report (40%), computer presentation (40%) and participation in discussion (10%).</p>	
Literatura podstawowa (wypełniane w języku prowadzenia zajęć, bez tłumaczenia tytułów publikacji)	<p>D. W. Heermann, Podstawy symulacji komputerowych w fizyce, WNT, Warszawa 1998</p> <p>Instrukcje do stosowanego oprogramowania dostępne w czasie zajęć</p>	
Literatura uzupełniająca (wypełniane w języku prowadzenia zajęć, bez tłumaczenia tytułów publikacji)	<p>A. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, 2-ed., Prentice Hall, 2001</p>	
Przeciętne obciążenie studenta pracą własną – ze zdefiniowaniem form pracy własnej (PL)	<p>Suma wszystkich form zajęć</p> <p>Udział w konsultacjach</p> <p>Udział w pisemnych i/lub praktycznych formach weryfikacji</p> <p>Przygotowanie się do kolokwium pisemnego</p> <p>Opracowanie projektu laboratoryjnego i zakończenie obliczeń</p> <p>Przygotowanie dokładnego sprawozdania z zakońzonego projektu</p> <p>Przygotowanie prezentacji i przygotowanie się do dyskusji nad wszystkimi projektami w grupie studenckiej</p>	<p>15</p> <p>5</p> <p>1</p> <p>5</p> <p>10</p> <p>6</p> <p>8</p>
	Suma godzin	50
Przeciętne obciążenie studenta pracą własną – ze zdefiniowaniem form pracy własnej (EN)	<p>Total hours of different forms of classes</p> <p>Participation in consultation</p> <p>Participation in written and/or practical forms of assessment</p> <p>Preparation for written test</p> <p>Preparation of the computational project and completion of the calculations</p> <p>Preparation of written report</p> <p>Preparation of the presentation and preparation for discussion on projects of other students in the group</p>	<p>15</p> <p>5</p> <p>1</p> <p>5</p> <p>10</p> <p>6</p> <p>8</p>
	Total hours	50
Uwagi (PL)	Wstępna rozmowa z grupą studencką umożliwić może zarówno	

	modyfikację zakresu wykładanego materiału, jak i rodzaju przeprowadzanych w czasie zajęć laboratoryjnych symulacji komputerowych
Uwagi własne publikowane (PL)	
Uwagi własne publikowane (EN)	
Data aktualizacji	28.02.2014