

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2021/2022

Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki

Kierunek studiów: Fizyka Techniczna - New

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: FT new

Stopień studiów: II

Specjalności: Modelowanie Komputerowe - New

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

NAZWA PRZEDMIOTU	Zastosowanie symulacji dynamiki molekularnej w inżynierii materiałowej
NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM	Applications of molecular dynamics in materials engineering
KOD PRZEDMIOTU	WIMiF FT NEW oIIS F2 21/22
KATEGORIA PRZEDMIOTU	Przedmioty wybieralne
LICZBA PUNKTÓW ECTS	3.00
SEMESTRY	2

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

SEMESTR	WYKŁAD	ĆWICZENIA	LABORATORIUM	LABORATORIUM KOMPUTERO- WE	SEMINARIUM	PROJEKT
2	15	0	15	0	0	15

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Cel przedmiotu 1 Celem jest praktyczne zastosowanie umiejętności prowadzenia symulacji do badania podstawowych własności rzeczywistych materiałów oraz analiza pozyskanych z symulacji charakterystyk

Cel 2 Cel przedmiotu 2 Umiejętność przygotowania projektu na z badania własności materiałów na podstawie przeprowadzonych indywidualnie symulacji.

Cel 3 Cel przedmiotu 3 Umiejętność prowadzenia dyskursu naukowego oraz analiza argumentów

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Wymaganie 1 Znajomość podstaw fizyki i matematyki w zakresie studiów I stopnia na kierunku technicznym.

2 Wymaganie 2 Znajomość technik symulacyjnych.

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Efekt kształcenia 1 Zapoznanie się z możliwościami programu Lammps.

EK2 Umiejętności Efekt kształcenia 2 Umiejętność przeprowadzenia symulacji wybranych systemów za pomocą programu Lammps.

EK3 Kompetencje społeczne Efekt kształcenia 3 K_K04

EK4 Wiedza Efekt kształcenia 4 Wiedza jak przetwarzać dane pozyskane z symulacji, prowadzić analizę własności fizycznych badanych systemów i ich charakterystyk materiałowych

EK5 Umiejętności Efekt kształcenia 5 Punkty: K_U01b do K_U14

6 TREŚCI PROGRAMOWE

WYKŁAD		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
W1	Treści programowe 1 Zapoznanie się ze składnią programu Lammps oraz jego opcjami według tutorialu laboratorium Sandia oraz z różnymi typami symulacji, jakie można prowadzić w tym programie. Szczegółowy spis treści znajduje się na stronie lammps.sandia.gov Symulacje podstawowe. 1. Propagacja pęknięcia w dwuwymiarowym kryształ Lennarda_Jonesa. 2. Adsorpcja molekuł na substracie 3. Zachowanie się cząstki koloidalnej w rozpuszczalniku 4. Gwałtowne topnienie 3D kryształu LJ 5. Wpływ naprężenia ścinającego na 2D kryształ 6. Wpływ naprężenia ścinającego na 2D kryształ zawierający wnękę (nanopor) 7. Symulacje zachowania metanolu 8. Symulacje struktury krzemu 9. Pojawienie się wakancji w krzemie oraz jej dyfuzja w strukturze wakancji w krzemie 10. Opadanie w polu grawitacyjnym i agregacja na wybranym podłożu prostych cząstek. 11. Ciekły kryształ prętopodobny 12. Opadanie i agregacja na podłożu cząstek o kształcie banana Zaawansowane badanie materiałów: 1. Symulacje nanocząstek metali, ich topnienia i krystalizacji. 2. Badanie struktury membrany poliuretanowej. Topnienie poliuretanu. 3. Badanie wytrzymałości nanodrutów metalicznych oraz nanowłókien polimerowych. Jak otrzymuje się krzywe obciążenia. 4. Symulacje soli kuchennej. 5. Symulacje krzemionki. 6. Badanie układów tetraedrów krzemionkowych. 7. Badanie powstawania mezoporów w krzemionce. 8. Symulacje krzemionki krystalicznej dla różnych ciśnień - odmiany kwarcu alfa i beta, stiszowitu, krystobalitu. 9. Symulacje szkieł. 10. Badanie własności anizotropowych wybranych układów ciekłokrystalicznych. 11. Faza twist bend. 12. Inne przykłady.	15

LABORATORIUM		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
L1	Treści programowe 1 Wykonanie ćwiczeń do tematów podanych w zakresie wykładu.	15

PROJEKT		
LP	TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH	LICZBA GODZIN
P1	Treści programowe 1 Wykonanie poszerzonych symulacji dynamiki molekularnej w programie Lammps dla wybranego materiału oraz wizualizacja i analiza danych.	15

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Narzędzie 1 Wykład

N2 Narzędzie 2 Modelowanie komputerowe materiałów

N3 Narzędzie 3 Dyskusja

N4 Narzędzie 4 Praca własna/ projekt

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

FORMA AKTYWNOŚCI	ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym:	
Godziny wynikające z planu studiów	45
Konsultacje przedmiotowe	15
Egzaminy i zaliczenia w sesji	0
Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym:	
Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury	10
Opracowanie wyników	10
Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji	10
SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA	90
SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU	3.00

9 SPOSOBY OCENY

OCENA FORMUJĄCA

F1 Ocena 1 Kolokwium

F2 Ocena 2 Sprawozdania z komputerowych ćwiczeń laboratoryjnych

F3 Ocena 3 Projekt

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Ocena 1 Średnia z ocen formujących

WARUNKI ZALICZENIA PRZEDMIOTU

W1 Ocena 1 zaliczenie wszystkich elementów podlegających ocenie formującej na ocenę pozytywną.

KRYTERIA OCENY

EFEKT KSZTAŁCENIA 1	
NA OCENĘ 2.0	Student nie zapoznał się z działaniem programu.
NA OCENĘ 3.0	Student opanował działanie elementarnych komend i skryptów.
NA OCENĘ 3.5	Student opanował działanie elementarnych komend i skryptów, ale nie wykazuje dużej samodzielności w kreowaniu nowych wariantów skryptów.
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi sam napisać oraz posługiwać się skryptami programowymi, ale potrzebuje podpowiedzi.
NA OCENĘ 4.5	Student potrafi sam napisać oraz posługiwać się skryptami programowymi. Możliwe drobne niedociągnięcia.
NA OCENĘ 5.0	Student potrafi sam napisać oraz doskonale posługiwać się skryptami programowymi.
EFEKT KSZTAŁCENIA 2	
NA OCENĘ 2.0	Student nie ma wymaganej umiejętności.
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi przeprowadzić tylko elementarne symulacje.
NA OCENĘ 3.5	Student ma wystarczającą umiejętność przeprowadzenia symulacji, ale potrzebuje wielu podpowiedzi.
NA OCENĘ 4.0	Student ma dobrze opanowaną umiejętność przeprowadzenia symulacji, ale nie zapoznał się ze wszystkimi wariantami.
NA OCENĘ 4.5	Student ma dobrze opanowaną wyżej opisaną umiejętność, ale możliwe są drobne niedociągnięcia.
NA OCENĘ 5.0	Student doskonale opanował daną umiejętność
EFEKT KSZTAŁCENIA 3	

NA OCENĘ 2.0	Student nie radzi sobie z oceną aspektów w K_K04
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi podać argumenty dotyczące społecznego znaczenia nauk przyrodniczych i technicznych, ale ilość przykładów jest skromna.
NA OCENĘ 3.5	Student potrafi podać argumenty dotyczące społecznego znaczenia nauk przyrodniczych i technicznych i docenia ich rolę, ale jego wypowiedzi nie są zbyt przekonujące.
NA OCENĘ 4.0	Student potrafi podać argumenty dotyczące społecznego znaczenia nauk przyrodniczych i technicznych i docenia ich rolę, a jego wypowiedzi można uznać za satysfakcjonujące.
NA OCENĘ 4.5	Student potrafi podać argumenty dotyczące społecznego znaczenia nauk przyrodniczych i technicznych i docenia ich rolę, ale jego argumentacja nie jest doskonała.
NA OCENĘ 5.0	Student potrafi doskonale uzasadnić rolę i znaczenie nauk technicznych podając szereg przekonujących argumentów.
EFEKT KSZTAŁCENIA 4	
NA OCENĘ 2.0	Student nie zna żadnych technik
NA OCENĘ 3.0	Student potrafi otrzymywać i opracowywać podstawowe dane, ale w jego pracach są liczne braki.
NA OCENĘ 3.5	Student potrafi otrzymywać i opracowywać podstawowe dane, ale wymagane są podpowiedzi.
NA OCENĘ 4.0	Student w sposób wystarczający wykonuje wszystkie zadania.
NA OCENĘ 4.5	Student wie jak przetwarzać dane symulacyjne i badać własności fizyczne, ale praca nie jest imponująca.
NA OCENĘ 5.0	Student doskonale wywiązuje się z zadań.
EFEKT KSZTAŁCENIA 5	
NA OCENĘ 2.0	nie osiąga efektów
NA OCENĘ 3.0	Umiejętności są tylko na podstawowym poziomie.
NA OCENĘ 3.5	Umiejętności są więcej niż na podstawowym poziomie.
NA OCENĘ 4.0	Umiejętności są na poziomie dobrym.
NA OCENĘ 4.5	Umiejętności są więcej niż na poziomie dobrym, ale możliwe małe niedociągnięcia.
NA OCENĘ 5.0	W każdym punkcie osiąga wysoki poziom.

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

EFEKT KSZTAŁCENIA	ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU	CELE PRZEDMIOTU	TREŚCI PROGRAMOWE	NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE	SPOSOBY OCENY
EK1		Cel 1	W1 L1 P1	N1 N2	F1 F2 F3 P1
EK2		Cel 1 Cel 2 Cel 3	W1 L1 P1	N1 N2 N3 N4	F1 F2 F3 P1
EK3		Cel 1 Cel 3	W1 L1	N1 N2 N3 N4	F1 F2 F3 P1
EK4		Cel 1 Cel 2 Cel 3	W1 L1 P1	N1 N2 N3 N4	F1
EK5		Cel 1 Cel 2 Cel 3	W1 L1 P1	N1 N2 N3 N4	F1 F2 F3 P1

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

[1] | Sandia Laboratory — *Tutorial Lammmps*, internet, 2021, Sandia

[2] | — *wybrane publikacje naukowe*, opublikowane w internecie, 0,

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH

OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ

dr hab. Agnieszka Chrzanowska (kontakt: agnieszka.chrzanowska@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. prof. PK Agnieszka Chrzanowska (kontakt: agnieszka.chrzanowska@pk.edu.pl)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejscowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....