

UČNI NAČRT PREDMETA / COURSE SYLLABUS

Predmet: Metode modeliranja v fiziki in inženirstvu
Course title:

Študijski program in stopnja Study programme and level	Študijska smer Study field	Letnik Academic year	Semester Semester
Sonaravne tehnologije in sistemi v strojništvu - 3. stopnja	/	1./2.	zimski/letni
Sustainable technologies and systems in mechanical engineering - 3 rd cycle	/	first/second	winter/summer

Vrsta predmeta / Course type

Univerzitetna koda predmeta / University course code:

Predavanja Lectures	Seminar Seminar	Vaje Tutorial	Klinične vaje work	Druge oblike študija	Samost. delo Individ. work	ECTS
10	30	10		/	250	10

Nosilec predmeta / Lecturer:

Jeziki / Languages:
Predavanja / Lectures: slovenski/Slovenian
Vaje / Tutorial: slovenski/Slovenian

Pogoji za vključitev v delo oz. za opravljanje študijskih obveznosti:

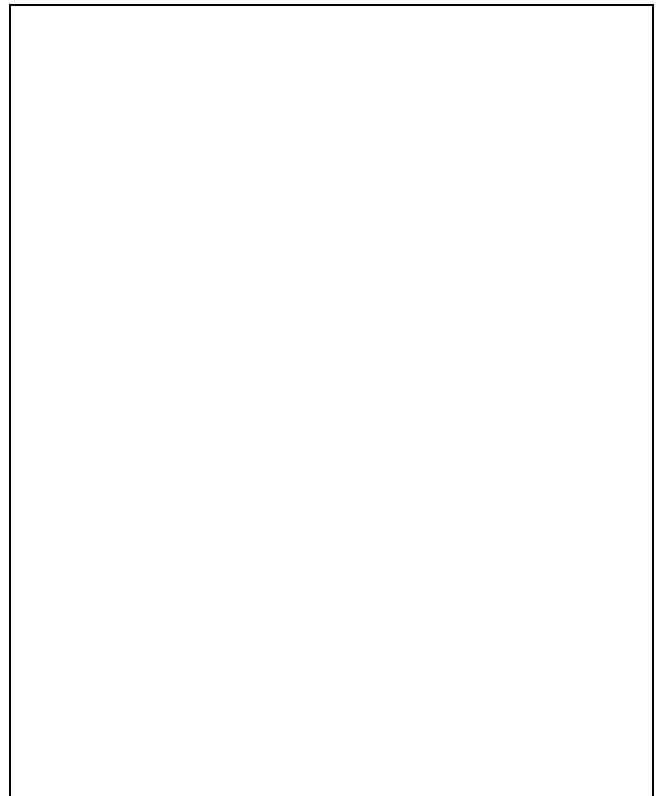
- Vpis v doktorski študijski program.
- Dodatnih pogojev ni.

Prerequisites:

Vsebina:

Content (Syllabus outline):

- Atomska struktura in medatomske interakcije v kondenzirani snovi, struktura kristalov, atomska dinamika ter mehanske lastnosti materialov, polimeri.
- Pregled metod statistične mehanike.
- Modeliranje na različnih velikostnih skalah: elektronska struktura, interakcije, medatomska polja sil, grobo zrnjenje
- Simulacije molekulske dinamike in Monte Carlo simulacije
- Računanje fizikalnih opazljivk iz simulacij ter primerjava z vibracijsko in NMR spektroskopijo, nevtronskim sipanjem, rentgenska difrakcijo.
- Modeliranje stohastičnih pojavov: Brownovo gibanje, Langevinova enačba, difuzija, prevajanje toplote, reakcijska kinetika.
- Modeliranje električnih in optičnih lastnosti materialov.



Temeljni literatura in viri / Readings:

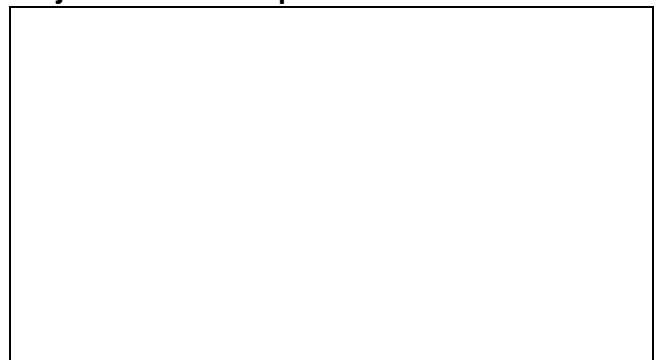
- [1] Callister, W.D., Rethwisch, D.G. (2014) Materials Science and Engineering: An Introduction, 9th Edition, Wiley.
- [2] Leach, A. R. (2001) Molecular Modelling: Principles and Applications, Prentice Hall.
- [3] Gardiner, G.W. (1997) Handbook of Stochastic Methods, Springer.
- [4] Frenkel, D., Smit, B. (2002) Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press.

Cilji in kompetence:

Učna enota prispeva predvsem k razvoju naslednjih specifičnih kompetenc:

- Sposobnost razumevanja in uporabe sodobnih teorij v naravoslovju za reševanje problemov v tehniki in inženirstvu.
- Sposobnost interdisciplinarnega povezovanja znanja.
- Sposobnost povezovanja fizikalno-kemijskih z mehanskimi lastnostmi materialov.

Objectives and competences:



Predvideni študijski rezultati:

- Študenti pridobijo znanje s področja metod modeliranja lastnosti materialov na podlagi fizikalnih principov. Razumejo povezanost

Intended learning outcomes:

Knowledge and understanding:

matematično-fizikalnih znanj ter znanj o materialih. Spoznajo najnovejše raziskave in delo raziskovalnih skupin na tem področju v širši regiji.

Metode poučevanja in učenja:

- frontalna predavanja z aktivno udeležbo študentov,
- avditorne in laboratorijske vaje,
- izdelava seminarske naloge.
- Individualno delo študenta.

Learning and teaching methods:

Načini ocenjevanja:

Način (pisni izpit, ustno izpraševanje, naloge, projekt)
Seminarska naloga
Ustni izpit

Delež (v %) /

Weight (in %)

50%

50%

Assessment:

Type (examination, oral, coursework, project):