

| | | |
|----|---------------------------|--|
| 1. | Nazwa kierunku | inżynieria biomedyczna |
| 2. | Wydział | Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych |
| 3. | Cykl rozpoczęcia | 2022/2023 (semestr letni) |
| 4. | Poziom kształcenia | studia drugiego stopnia (inżynierskie) |
| 5. | Profil kształcenia | ogólnoakademicki |
| 6. | Forma prowadzenia studiów | stacjonarna |

Moduł kształcenia: Podstawy metod ab initio komputerowego modelowania biomateriałów

Kod modułu: 08-IBOM-S2-18-2-PMIAI

1. Liczba punktów ECTS: 3

| 2. Zakładane efekty uczenia się modułu | | | |
|---|--|------------------------------------|---------------------------------------|
| kod | opis | efekty uczenia się kierunku | stopień realizacji (skala 1-5) |
| k_1 | przywołuje wiedzę dotycząca metod modelowania ab initio materiałów nieuporządkowanych atomowo | W02 | 3 |
| k_2 | prezentuje rozumienie zasad doboru przybliżeń stosowanych we współczesnych metodach kwantowych obliczeń ab initio | W04 W08 | 4 5 |
| k_3 | odtwarza wiedzę w zakresie podstaw kwantowych współczesnych metod ab initio teoretycznego modelowania biomateriałów | W10 | 1 |
| k_4 | charakteryzuje różnice pomiędzy pełnoelektronowymi i pseudopotencjałowymi metodami kwantowego modelowania właściwości materiałów uporządkowanych | W12 | 4 |
| k_5 | używa pakiet dedykowany do kwantowych obliczeń właściwości mikroskopowych i makroskopowych biomateriałów | W13 | 1 |
| k_6 | dobiera właściwe metody obliczeń ab initio dla wykonania modelowania w celu osiągnięcia określonego celu badań biomateriałów, praktycznej realizacji tych obliczeń oraz dogłębnej analizy wyników obliczeń | U11 | 4 |
| k_7 | realizuje modelowanie ab initio dla biomateriałów nieuporządkowanych atomowo | U12 | 3 |
| k_8 | pogłębia umiejętności pracy zespołowej oraz zrozumienie konieczności systematycznej pracy nad projektami, które mają długofalowy charakter | K04 | 2 |
| k_9 | tworzy nowe rozwiązania teoretyczne | K06 | 1 |

3. Opis modułu

| | |
|-------------|--|
| Opis | Moduł Podstawy metod ab initio komputerowego modelowania biomateriałów ma umożliwić studentowi zapoznanie się ze współczesnymi kwantowymi metodami stosowanymi w modelowaniu teoretycznym materiałów uporządkowanych i nieuporządkowanych atomowo. Dzięki temu student będzie przygotowany do korzystania z dostępnego w laboratoriach badawczych oprogramowania do obliczeń struktury elektronowej, modelowania |
|-------------|--|

| | |
|--------------------------|--|
| | termodynamicznego nowych materiałów oraz wykorzystania wyników dla określenia właściwości fizycznych i chemicznych badanych oraz projektowanych biomateriałów. |
| Wymagania wstępne | |

| 4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu | | | |
|--|-----------------------|---|----------------------------------|
| kod | nazwa (typ) | opis | efekty uczenia się modułu |
| k_w_1 | Egzamin pisemny | Weryfikacja wiedzy w oparciu o treść wykładów, wskazaną literaturę oraz odbyte ćwiczenia | k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 |
| k_w_2 | Sprawdzian praktyczny | Ocena opanowania podstawowych wiadomości niezbędnych do indywidualnego wykonania obliczeń ab initio biomateriałów. | k_6, k_7, k_8, k_9 |
| k_w_3 | Sprawozdanie | Ocena umiejętności analizy rezultatów obliczeń i powiązania z właściwościami biomateriałów poprzez poprawne formułowanie wniosków. Umiejętność tworzenia zwięzłego opracowania uzyskanych rezultatów w zestawieniu wynikami wcześniejszych symulacji i obliczeń | k_8, k_9 |

| 5. Rodzaje prowadzonych zajęć | | | | | | |
|--------------------------------------|----------------------------------|--|----------------------|--|----------------------|--|
| kod | rodzaj prowadzonych zajęć | | | praca własna studenta | | sposoby weryfikacji efektów uczenia się |
| | nazwa | opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych) | liczba godzin | opis | liczba godzin | |
| k_fs_1 | wykład | Wykład ma umożliwić poznanie podstaw kwantowych, stosowanych przybliżeń oraz zakresu zastosowań oraz ograniczeń współczesnych metod ab initio służących do modelowania biomateriałów. Wykład prowadzony jest z wykorzystaniem środków multimedialnych i demonstracji z użyciem pakietów WIEN2k i VASP. | 15 | Praca ze wskazaną literaturą obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy w odniesieniu do podstawowych zagadnień | 35 | k_w_1 |
| k_fs_2 | laboratorium | Zastosowanie poznanej teoretycznej wiedzy w praktycznych obliczeniach struktury oraz właściwości mikroskopowych i makroskopowych biomateriałów. Ćwiczenia wykonywane są indywidualnie/zespołowo przez studentów z wykorzystaniem wyposażenia pracowni dydaktycznych i badawczych. | 25 | Przygotowanie teoretycznych podstaw i zagadnień związanych z tematem wykonywanego ćwiczenia oraz przygotowanie niezbędnych danych. Samodzielne/zespołowe opracowanie wstępu teoretycznego i prezentacji wyników ćwiczenia. | 45 | k_w_2, k_w_3 |