

1.	Nazwa kierunku	inżynieria materiałowa
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2025/2026 (semestr letni)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

7.	Informacje podstawowe o module	
Nazwa modułu		Komputerowe modelowanie struktury i właściwości materiałów
Kod modułu		IM2A_KMSM
Liczba punktów ECTS		4
Język wykładowy		polski
Cel i opis treści kształcenia		Moduł Komputerowe modelowanie struktury i właściwości materiałów ma umożliwić studentowi/studentce zapoznanie się z formalizmem kwantowym w zastosowaniu do obliczeń numerycznych właściwości mikroskopowych małych (skończonych) oraz rozciągłych (periodycznych) układów fizycznych. Dzięki temu student/studentka będzie przygotowana 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 materiałów.
Lista modułów koniecznych do zaliczenia przed przystąpieniem do tego modułu (o ile to konieczne)		nie dotyczy

8.	Zakładane efekty uczenia się modułu			
Kod	Opis	Efekty uczenia się kierunku	Stopień realizacji (skala 1-5)	
IM2A_KMSM_1	Zna oraz rozumie pojęcia i postulaty mechaniki kwantowej oraz ma wiedzę w zakresie modelowania kwantowego małych układów. Ma wiedzę w zakresie modeli struktury elektronowej układów periodycznych: model elektronów prawie swobodnych, przybliżenie ciasnego wiązania. Zna oraz rozumie przybliżone metody mechaniki kwantowej: rachunek zaburzeń, rachunek wariacyjny.	IM2A_W01 IM2A_W09	3 3	
IM2A_KMSM_2	Posiada wiedzę w zakresie opisu kwantowego układów wieloelektronowych – rozumie istotę przybliżenia Borna-Oppenheimera, kwantowych metod jednocząstkowych (Hartree, Hartree-Focka, Thomasa-Fermiego) oraz metody funkcjonału gęstości Hohenberga-Kohna-Shama. Zna co najmniej jeden pakiet oprogramowania, służący do kwantowych obliczeń właściwości mikroskopowych i makroskopowych materiałów inżynierskich.	IM2A_W01 IM2A_W09	3 3	
IM2A_KMSM_3	Potrafi w sposób zrozumiały sformułować definicje i postulaty mechaniki kwantowej. Posługuje się rachunkiem kwantowym dla prostych układów kwantowo-mechanicznych. Potrafi w sposób zrozumiały umówić założenia oraz zasadnicze rezultaty podstawowych kwantowych modeli struktury elektronowej układów periodycznych.	IM2A_U01 IM2A_U08	3 3	
IM2A_KMSM_4	Potrafi przedstawić założenia, możliwości i ograniczenia metod klasycznych i metod ab initio modelowania procesów zachodzących w materiałach inżynierskich, uzasadnić wybór modelu do rozwiązania prostego problemu badawczego. Potrafi wykonać klasyczne modelowanie oraz obliczenia ab initio właściwości mikro- i makro-skopowych materiałów	IM2A_U08	3	

	inżynierskich oraz przeprowadzić testy założonego modelu i interpretację rezultatów obliczeń z zastosowaniem wybranych pakietów obliczeniowych(WIEN2k, Quantum Espresso, LAMMPS).		
IM2A_KMSM_5	Ma świadomość ograniczenia jednostkowej metody badawczej i widzi konieczność wszechstronnej, naukowej analizy problemów z zakresu inżynierii materiałowej. Ma świadomość i zna możliwości dalszego dokształcania się w zakresie nowoczesnych metod symulacji komputerowych w zastosowaniu w inżynierii materiałowej.	IM2A_K01 IM2A_U03	3 3

9. Metody prowadzenia zajęć		
Kod	Kategoria	Nazwa (opis)
a01	Zbiór metod asymilacji wiedzy / podających	Wykład informacyjny/kursowy systematyczny kurs z określonej dyscypliny naukowej w ujęciu syntetycznym; realizacja zakłada bierny odbiór przekazanych informacji
a05	Zbiór metod asymilacji wiedzy / podających	Objaśnienie/wyjaśnienie eksplicacja polegająca na wyprowadzeniu uznanego z góry twierdzenia z innych, wcześniej już znanych, w określonej przez osobę prowadzącą zajęcia liczbie kroków
b01	Zbiór metod problemowych	Wykład problemowy analiza wybranego problemu naukowego lub praktycznego z weryfikacją i próbą rozwiązania wykładanych kwestii oraz wskazaniem konsekwencji wynikających z tego rozwiązania
c07	Zbiór metod eksponujących	Prezentacja mechaniczne przedstawienie syntetycznego obrazu treści w formie grafiki prezentacyjnej, np. szeregu slajdów lub innych form multimedialnych zwykle z omówieniem/innym komentarzem; typowe składniki prezentacji - tekst ujęty w punkty, wykresy, grafika (obrazy) i animacje; ew. efekty dźwiękowe lub muzyka; ilustracja multimedialna treści zajęć prezentowana w formie rzutowanego obrazu
d01	Zbiór metod programowanych	Praca z komputerem np. Webquest - realizacja zadań edukacyjnych z wykorzystaniem urządzeń elektronicznych, cyfrowych, programów komputerowych i aplikacji internetowych; NA pełni funkcję konsultanta; praca studentów przebiega według określonego przez osobę prowadzącą zajęcia planu z uwzględnieniem etapów i instrukcji oraz zmierza do wypracowania wskazanych rezultatów w ustalonym terminie
d02	Zbiór metod programowanych	Praca z podręcznikiem programowym praca z wykorzystaniem podręcznika zawierającego strukturę obejmującą część lub całość programu nauczania modułu z określoną formułą studiowania treści; w tym praca z podręcznikiem przedmiotowym, atlasem, katalogiem, zbiorem zadań, itp.
f01	Metody samodzielnego uczenia się	Autoedukacja metoda samodzielnego zdobywania, pogłębiania lub poszerzania wiedzy, umiejętności i komp. społ.; metoda komplementarna do procesu kształcenia realizowanego w ramach zajęć; przejmowanie zadania rozwijania i kształtowania kwalifikacji we własnym zakresie; samokształcenie
f02	Metody samodzielnego uczenia się	Indywidualna praca z tekstem poszukiwanie i zdobywanie nowych wiadomości z wykorzystaniem podręczników i innych źródeł pisanych (w tym w wersji cyfrowej); wyszukiwanie tekstów, dobór fragmentów do analizy/interpretacji, wykorzystanie innych tekstów do rozwiązania problemu w ramach studiowanego zagadnienia
f03	Metody samodzielnego uczenia się	Praca koncepcyjna samodzielnie (lub w wybranej grupie) realizowana aktywność (gł. intelektualna) skutkująca powstaniem pomysłu, idei, projektu; tworzenie planu w oparciu o wizję; opracowanie ogólnego zarysu projektu; wytworzenie uproszczonego szkicu wariantów postępowania/wytworu/dzieła

10. Formy prowadzonych zajęć					
Kod	Nazwa	Liczba godzin	Sposób weryfikacji efektów uczenia się	Efekty uczenia się modułu	Metody prowadzenia zajęć
IM2A_KMSM_fs_1	wykład	30	egzamin	IM2A_KMSM_1, IM2A_KMSM_2, IM2A_KMSM_3, IM2A_KMSM_4, IM2A_KMSM_5	a01, b01, c07
IM2A_KMSM_fs_2	laboratorium	60	zaliczenie	IM2A_KMSM_1, IM2A_KMSM_2, IM2A_KMSM_3, IM2A_KMSM_4, IM2A_KMSM_5	a05, d01, d02, f01, f02, f03

11. Praca studenta poza udziałem w zajęciach obejmuje w szczególności:			
Kod	Kategoria	Nazwa (opis)	Czy częściowo zalicza się do BUNA-y?
a01	Przygotowanie do zajęć	Kwerenda materiałów i przegląd działań niezbędnych do uczestnictwa w zajęciach <i>przegląd literatury, dokumentacji, narzędzi i materiałów oraz specyfiki i zakresu działań wskazanych w sylabusie jako wymagane do pełnego uczestnictwa w zajęciach</i>	Nie
a02	Przygotowanie do zajęć	Czytanie literatury / analiza materiałów źródłowych <i>czytanie literatury wskazanej w sylabusie; przegląd, porządkowanie, analiza i wybór materiałów źródłowych do wykorzystania w ramach zajęć</i>	Nie
a03	Przygotowanie do zajęć	Ćwiczenie praktycznych umiejętności <i>czynności polegające na powtarzaniu, doskonaleniu i utrwalaniu praktycznych umiejętności, w tym ćwiczonych podczas odbytych wcześniej zajęć lub nowych, niezbędnych z punktu widzenia realizacji kolejnych elementów programu (jako przygotowanie się uczestnictwa w zajęciach)</i>	Nie
c01	Przygotowanie do weryfikacji efektów uczenia się	Ustalanie etapów realizacji zadań przyczyniających się do weryfikacji efektów uczenia się <i>przygotowanie strategii realizacji zadania uwzględniającej podział treści, czynności i ich zakres, czas realizacji oraz/lub sposób pozyskania niezbędnych do jego wykonania materiałów i narzędzi, itp.</i>	Nie
c03	Przygotowanie do weryfikacji efektów uczenia się	Realizacja indywidualnego lub grupowego zadania zaliczeniowego/egz./etapowego <i>zbiór czynności zmierzających do wykonania zadania zleconego do realizacji poza zajęciami, jako obligatoryjnego etapu/elementu weryfikacji przypisanych do tych zajęć efektów uczenia się</i>	Nie
d01	Konsultowanie wyników weryfikacji efektów uczenia się	Analiza korekt/informacji zwrotnej ze strony NA dotyczących wyników wer. ef. ucz. <i>przegląd uwag, ocen i opinii sporządzonych przez NA odnoszących się do realizacji zadania sprawdzającego poziom osiągniętych efektów uczenia się</i>	Tak
d02	Konsultowanie wyników weryfikacji efektów uczenia się	Opracowanie planu korekty i zadań uzupełniających/korygujących <i>przegląd i wybór zadań oraz czynności pozwalających na eliminację wskazanych przez NA błędów, ich weryfikację lub poprawę oraz zaliczenie zadania na, co najmniej, najniższym dopuszczalnym poziomie</i>	Tak

Informacje dotyczące szczegółów realizacji modułu w danym roku akademickim znajdują się w sylabusie dostępnym w systemie USOS: <https://usosweb.us.edu.pl>.