

1.	Nazwa kierunku	inżynieria materiałowa
2.	Cykl rozpoczęcia	2017/2018 (semestr zimowy)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia (inżynierskie)
4.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
5.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Komputerowe modelowanie struktury i właściwości materiałów

Kod modułu: IM2A_KMSM

1. Liczba punktów ECTS: 4

2. Zakładane efekty kształcenia modułu			
kod	opis	efekty kształcenia kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
IM2A_KMSM_1	Zna oraz rozumie podstawowe pojęcia i postulaty mechaniki kwantowej oraz ma podstawową wiedzę w zakresie dokładnego modelowania kwantowego małych układów. Ma podstawową 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_W11	5 1
IM2A_KMSM_2	Posiada podstawową 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 na poziomie podstawowym co najmniej jeden dedykowany pakiet oprogramowania, służący do kwantowych obliczeń właściwości mikroskopowych i makroskopowych materiałów inżynierskich.	IM2A_W01 IM2A_W15	5 5
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_U02 IM2A_U09	5 1
IM2A_KMSM_4	Potrafi w sposób zrozumiały przedstawić ograniczenia kwantowej mechaniki w zastosowaniu do problemu układów wieloelektronowych oraz omówić przybliżenia niezbędne do kwantowego rozwiązania tego problemu. Potrafi określić 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 inżynierskich oraz przeprowadzić testy założonego modelu i interpretację rezultatów obliczeń z zastosowaniem wybranych pakietów obliczeniowych (WIEN2k, Quantum Espresso, LAMMPS).	IM2A_U07 IM2A_U08	4 4
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 doksztalcenia się w zakresie nowoczesnych metod symulacji komputerowych w zastosowaniu w inżynierii materiałowej.	IM2A_K01 IM2A_K04	3 3
IM2A_KMSM_6	Ma świadomość ograniczenia jednostkowej metody badawczej i widzi konieczność wszechstronnej, naukowej analizy problemów	IM2A_K01	3

	z zakresu inżynierii materiałowej. Ma świadomość i zna możliwości dalszego dokształcania się w zakresie nowoczesnych metod symulacji komputerowych w zastosowaniu w inżynierii materiałowej.	IM2A_K04	3
--	--	----------	---

3. Opis modułu	
Opis	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 rozciągniętych (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.
Wymagania wstępne	Wymagana jest realizacja efektów kształcenia modułów analizy matematycznej, fizyki ciała stałego, chemii, krytalografii, metod badań materiałów oraz termodynamiki

4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty kształcenia modułu
IM2A_KMSM_w_1	Egzamin pisemny	Weryfikacja wiedzy w oparciu o treść wykładów, wskazaną literaturę oraz odbyte ćwiczenia	IM2A_KMSM_1, IM2A_KMSM_2, IM2A_KMSM_3, IM2A_KMSM_4, IM2A_KMSM_5, IM2A_KMSM_6
IM2A_KMSM_w_2	Kolokwium pisemne	Sprawdzenie nabytych umiejętności w zakresie obliczeń kwantowych dla modelowych układów kwantowych	IM2A_KMSM_1, IM2A_KMSM_2, IM2A_KMSM_3, IM2A_KMSM_4
IM2A_KMSM_w_3	Sprawdzian praktyczny	Ocena opanowania podstawowych wiadomości niezbędnych do indywidualnego wykonania obliczeń kwantowych materiałów inżynierskich	IM2A_KMSM_1, IM2A_KMSM_2
IM2A_KMSM_w_4	Sprawozdanie	Ocena umiejętności rozumienia rezultatów obliczeń i powiązania z właściwościami materiałów inżynierskich poprzez poprawne formułowanie wniosków	IM2A_KMSM_3, IM2A_KMSM_4, IM2A_KMSM_5

5. Rodzaje prowadzonych zajęć						
kod	rodzaj prowadzonych zajęć			praca własna studenta		sposoby weryfikacji efektów kształcenia
	nazwa	opis (z uwzględnieniem metod dydaktycznych)	liczba godzin	opis	liczba godzin	
IM2A_KMSM_fs_1	wykład	Wykład ma umożliwić poznanie podstaw i procedur kwantowego opisu małych układów kwantowych i periodycznych struktur wieloelektronowych oraz zaznajomić z zasadami i procedurami modelowania	30	Praca ze wskazaną literaturą obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy w odniesieniu do podstawowych zagadnień	20	IM2A_KMSM_w_1

		kwantowego w zastosowaniu do inżynierii materiałowej. Wykład prowadzony jest z wykorzystaniem środków multimedialnych, demonstracji oraz programu WIEN2k.				
IM2A_KMSM_fs_3	laboratorium	Zastosowanie poznanych wiadomości teoretycznej wiedzy w praktycznych obliczeniach struktury oraz właściwości mikroskopowych i makroskopowych materiałów inżynierskich. Ćwiczenia wykonywane są indywidualnie przez studentów z wykorzystaniem wyposażenia pracowni dydaktycznych.	60	Przygotowanie teoretycznych podstaw i zagadnień związanych z tematem wykonywanego ćwiczenia. Samodzielne opracowanie wstępu teoretycznego. Indywidualne opracowanie wyników ćwiczenia.	15	IM2A_KMSM_w_2, IM2A_KMSM_w_3, IM2A_KMSM_w_4