

1.	<b>Nazwa kierunku</b>	<b>inżynieria materiałowa</b>
2.	Cykl rozpoczęcia	2018/2019 (semestr letni)
3.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
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 z 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 doskonalenia się w zakresie nowoczesnych metod symulacji komputerowych w zastosowaniu w inżynierii materiałowej.	IM2A_K04	3
--	---	----------	---

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

<b>4. Sposoby weryfikacji efektów kształcenia modułu</b>			
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

<b>5. Rodzaje prowadzonych zajęć</b>						
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