

1.	Field of study	Biomedical Engineering
2.	Academic year of entry	2018/2019 (summer term)
3.	Level of qualifications/degree	second-cycle studies (in engineering)
4.	Degree profile	general academic
5.	Mode of study	full-time

Module: Basics of ab initio methods of computer modelling of biomaterials

Module code: 08-IBOM-S2-18-2-PMAl

1. Number of the ECTS credits: 3

2. Learning outcomes of the module			
code	description	learning outcomes of the programme	level of competence (scale 1-5)
k_1	przywołuje wiedzę dotyczącą 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. Module description	
Description	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.
Prerequisites	Wymagana jest realizacja efektów kształcenia modułów: fizyki ciała stałego, chemii, krystalografii, metod badań materiałów.

4. Assessment of the learning outcomes of the module			
code	type	description	learning outcomes of the module
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. Forms of teaching						
code	form of teaching			required hours of student's own work		assessment of the learning outcomes of the module
	type	description (including teaching methods)	number of hours	description	number of hours	
k_fs_1	lecture	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	laboratory classes	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