

1.	Nazwa kierunku	inżynieria materiałowa
2.	Wydział	Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
3.	Cykl rozpoczęcia	2019/2020 (semestr letni), 2020/2021 (semestr letni), 2021/2022 (semestr letni), 2022/2023 (semestr letni), 2023/2024 (semestr letni), 2024/2025 (semestr letni)
4.	Poziom kształcenia	studia drugiego stopnia
5.	Profil kształcenia	ogólnoakademicki
6.	Forma prowadzenia studiów	stacjonarna

Moduł kształcenia: Przedmiot specjalistyczny 2. Podstawy metod ab initio komputerowego modelowania materiałów

Kod modułu: IM2A_PS2_PMA

1. Liczba punktów ECTS: 4

2. Zakładane efekty uczenia się modułu

kod	opis	efekty uczenia się kierunku	stopień realizacji (skala 1-5)
IM2A_PS2_PMA_1	Wiedza w zakresie podstaw kwantowych współczesnych metod ab initio teoretycznego modelowania materiałów inżynierskich. Znajomość i rozumienie zasad doboru przybliżeń dla potencjału wymiennie-korelacyjnego oraz sposobów modelowania potencjału krystalicznego i jednoelektronowych funkcji falowych stosowanych we współczesnych metodach kwantowych obliczeń ab initio. Znajomość i rozumie nie różnic pomiędzy pełnoelektronowymi i pseudopotencjałowymi metodami kwantowego modelowania właściwości materiałów uporządkowanych.	IM2A_W01	5
IM2A_PS2_PMA_2	Znajomość na poziomie rozszerzonym co najmniej dwa dedykowane pakiety oprogramowania służące do kwantowych obliczeń właściwości mikroskopowych i makroskopowych materiałów inżynierskich. Wiedza dotycząca metod modelowania ab initio materiałów nieuporządkowanych atomowo.	IM2A_W01	5
IM2A_PS2_PMA_3	Umiejętność zrozumiałego przedstawiania podstaw teoretycznych współczesnych metod kwantowych obliczeń ab initio stosowanych w modelowaniu materiałów. Umiejętność w sposób zrozumiały omówienia ograniczeń poznanych metod oraz wyjaśnienia zagadnienia związane ze stosowanymi w tych metodach przybliżeniami.	IM2A_U02 IM2A_U07 IM2A_U09	2 5 5
IM2A_PS2_PMA_4	Umiejętność doboru właściwej metody obliczeń ab initio dla wykonania modelowania w celu osiągnięcia określonego celu badań materiałów inżynierskich, praktycznej realizacji tych obliczeń oraz dogłębnej analizy wyników obliczeń. Umiejętność realizacji modelowanie ab initio dla materiałów nieuporządkowanych atomowo.	IM2A_U07	5
IM2A_PS2_PMA_5	Wykształcenie odpowiedzialności za rzetelną realizację projektu obliczeniowego. Pogłębienie umiejętności pracy zespołowej oraz zrozumienie konieczności systematycznej pracy nad projektami, które mają długofalowy charakter. Przygotowanie do aktywnego uczestnictwa w zespołowej realizacji projektu.	IM2A_K03	3

3. Opis modułu	
Opis	Moduł Podstawy metod ab initio komputerowego modelowania materiałów ma umożliwić studentowi/studentce zapoznanie się ze współczesnymi kwantowymi metodami stosowanymi w modelowaniu teoretycznym materiałów uporządkowanych i nieuporządkowanych atomowo. 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: fizyki ciała stałego, chemii, krystalografii, metod badań materiałów oraz modułu IM2A_KMSM, IM2A_SIECI.

4. Sposoby weryfikacji efektów uczenia się modułu			
kod	nazwa (typ)	opis	efekty uczenia się modułu
IM2A_PS2_PMA_w_1	Egzamin pisemny	Weryfikacja wiedzy w oparciu o treść wykładów, wskazaną literaturę oraz odbyte ćwiczenia.	IM2A_PS2_PMA_1, IM2A_PS2_PMA_2, IM2A_PS2_PMA_3, IM2A_PS2_PMA_4, IM2A_PS2_PMA_5
IM2A_PS2_PMA_w_3	Sprawdzian	Ocena opanowania podstawowych wiadomości niezbędnych do indywidualnego wykonania obliczeń kwantowych materiałów inżynierskich.	IM2A_PS2_PMA_1, IM2A_PS2_PMA_2, IM2A_PS2_PMA_3, IM2A_PS2_PMA_4, IM2A_PS2_PMA_5
IM2A_PS2_PMA_w_4	Sprawozdanie	Ocena umiejętności rozumienia rezultatów obliczeń i powiązania z właściwościami materiałów inżynierskich poprzez poprawne formułowanie wniosków.	IM2A_PS2_PMA_1, IM2A_PS2_PMA_2, IM2A_PS2_PMA_3, IM2A_PS2_PMA_4, IM2A_PS2_PMA_5

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	
IM2A_PS2_PMA_fs_1	wykład	Wykład ma umożliwić poznanie podstaw kwantowych, stosowanych przybliżeń oraz zakresu zastosowań oraz ograniczeń współczesnych metod ab initio służących do modelowania materiałów. Wykład prowadzony jest z wykorzystaniem środków multimedialnych i demonstracji z użyciem pakietów WIEN2k i VASP.	30	Praca ze wskazaną literaturą obejmująca samodzielne przyswojenie wiedzy w odniesieniu do podstawowych zagadnień.	25	IM2A_PS2_PMA_w_1
IM2A_PS2_PMA_fs_3	laboratorium	Zastosowanie poznanej teoretycznej wiedzy w praktycznych obliczeniach struktury oraz właściwości mikroskopowych i	30	Przygotowanie teoretycznych podstaw i zagadnień związanych z tematem wykonywanego ćwiczenia oraz	40	IM2A_PS2_PMA_w_3, IM2A_PS2_PMA_w_4

		makroskopowych materiałów inżynierskich. Ćwiczenia wykonywane są indywidualnie/ zespołowo przez studentów z wykorzystaniem wyposażenia pracowni dydaktycznych i badawczych.		przygotowanie niezbędnych danych. Samodzielne/zespołowe opracowanie wstępu teoretycznego i prezentacji wyników ćwiczenia.		
--	--	---	--	--	--	--