



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Komputerowe modelowanie materiałów II, PG_00048739						
Kierunek studiów	Inżynieria materiałowa, Inżynieria materiałowa, Inżynieria materiałowa						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2022 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2021/2022		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			2.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			zaliczenie		
Jednostka prowadząca	Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej -> Katedra Fizyki Ciała Stałego						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot	dr hab. Maciej Bobrowski					
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu	dr hab. Maciej Bobrowski					
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	0.0	0.0	45.0	0.0	0.0	45
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
	Dodatkowe informacje: Zajęcia prowadzone w trybie stacjonarnym. Jeśli zajdzie potrzeba - w trybie online.						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów	Udział w konsultacjach		Praca własna studenta		RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	45	5.0		5.0		55
Cel przedmiotu	Na przykładach i we wstępach teoretycznych do ćwiczeń:  <ol style="list-style-type: none"><li>1. wykazanie zależności pomiędzy właściwościami materiałów i ich strukturą,</li><li>2. wykazanie potrzeby stosowania metod teoretycznych w badaniach właściwości materiałów,</li><li>3. nauczenie umiejętności budowy struktur cząsteczek w schemacie różnych rodzajów współrzędnych, oraz budowanie układów większych mniejszych, zbudowanych wcześniej.</li><li>4. nauczenie wykorzystania metod kwantowych przy pomocy specjalistycznego oprogramowania,</li><li>5. nauczenie wizualizacji wyników obliczeń oraz analizy tych wyników w przykładach realizacji.</li></ol>						

Efekty uczenia się przedmiotu	Efekt kierunkowy	Efekt z przedmiotu	Sposób weryfikacji i oceny efektu
	[K7_K01] rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób. ma świadomość własnych ograniczeń i wie, kiedy zwrócić się do ekspertów, potrafi odpowiednio określić priorytety służące realizacji określonego przez siebie lub innych zadań	Doświadczenie ograniczoności wykorzystanych metod. Porównanie wyników z danymi z eksperymentu i z literatury.	[SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK5] Ocena umiejętności rozwiązywania problemów występujących w praktyce
	[K7_U07] potrafi planować i organizować pracę indywidualną oraz w zespołach	Grupa potrafi razem podzielić się zadaniami do wykonania i na koniec zajęć porównać wyniki i wyciągnąć wnioski.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania [SU1] Ocena realizacji zadania
	[K7_W02] zna techniki doświadczalne, obserwacyjne i numeryczne oraz metody budowy modeli matematycznych właściwych dla inżynierii materiałowej; potrafi samodzielnie odtworzyć podstawowe twierdzenia i prawa oraz ich dowody	Umiejętność rozpoznania wyników stosowania zasady zachowania energii, momentu pędu. Umiejętność rozpoznania i zadania struktury elektronowej atomów i molekuł. Umiejętność rozpoznania ścieżki do uzyskania lepszego materiału.	[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej [SW2] Ocena wiedzy zawartej w prezentacji
[K7_U01] potrafi pozyskiwać informacje z literatury, baz danych oraz innych, właściwie dobranych źródeł, także w języku angielskim; potrafi integrować uzyskane informacje, dokonywać ich interpretacji, a także wyciągać wnioski oraz formułować i uzasadniać opinie	1. Przekształcenie zagadnienia w model i problem do rozwiązania, w oparciu o prawa fizyki i chemii. 2. Przedstawienie zagadnienia w celu udoskonalenia materiału, w konkretnych przykładach, również proponowanych przez samych studentów. 3. Analiza i interpretacja wyników obliczeń.	[SU2] Ocena umiejętności analizy informacji [SU3] Ocena umiejętności wykorzystania wiedzy uzyskanej w ramach przedmiotu [SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU5] Ocena umiejętności zaprezentowania wyników realizacji zadania	
Treści przedmiotu	<ol style="list-style-type: none"> <li>Przypomnienie narzędzi obsługi systemu operacyjnego niezbędnych do pracy z oprogramowaniem służącym modelowaniu materiałów i procesów związanych z materiałami.</li> <li>Wstępy teoretyczne z teorii metod kwantowych i podstawowych algorytmów: operatory, funkcje falowe, równanie własne, równanie Schrödingera, metody wariacyjne, metoda Hartree-Focka.</li> <li>Samodzielne budowanie struktur układów przeznaczonych do symulacji.</li> <li>Omówienie zasad obsługi specjalistycznego oprogramowania.</li> <li>Samodzielne przeprowadzanie obliczeń metodami kwantowymi przy pomocy specjalistycznego oprogramowania.</li> </ol>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Chemia. Podstawy fizyki i matematyki.		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	Sposób oceniania (składowe)	Próg zaliczeniowy	Składowa ocena końcowej
	Zaliczenie praktyczne	50.0%	100.0%
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> <li>Lucjan Piela, Idee Chemii Kwantowej, PWN, Warszawa, 2003 i nowsze,</li> <li>Włodzimierz Kołos. Chemia kwantowa. PWN, Warszawa, 1978,</li> <li>Włodzimierz Kołos, Joanna Sadlej. Atom i cząsteczka. WNT, Warszawa, 2007.</li> <li>Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, England, 2007.</li> <li>Materiały PDF prowadzącego.</li> <li>materiały dokumentacyjne programu Gamess US, np. <a href="http://wild.life.nctu.edu.tw/~jsyu/gamess2k/index.html">http://wild.life.nctu.edu.tw/~jsyu/gamess2k/index.html</a></li> </ol>	
	Uzupełniająca lista lektur	Publikacje naukowe (Elsevier, AIP, ACS, etc.) przekazywane po wyborze zadania do samodzielnej realizacji.	
	Adresy eZasobów		
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Pokaż, że operatory hermitowskie dają wartości własne rzeczywiste. Dla zadanej funkcji oblicz energię metodą wariacyjną, Zdefiniuj orbitale atomowe i molekularne w zadanej bazie funkcji, Oblicz energię elektronową zadanej konfiguracji elektronowej. Przypisz spiny i multipletowości. Jak polepszyć elastyczność polimeru? Jak uzyskać nanocząstki o lepszym potencjale redoks?</p>		
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu			