



# Projektowanie struktury i właściwości układów wieloskładnikowych

## Karta opisu przedmiotu

### Informacje podstawowe

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Kierunek studiów</b><br>Inżynieria Materiałowa<br><b>Specjalność</b><br>Wszystkie<br><b>Jednostka organizacyjna</b><br>Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki<br><b>Poziom kształcenia</b><br>Studia magisterskie II stopnia<br><b>Forma studiów</b><br>Stacjonarne<br><b>Profil studiów</b><br>Ogólnoakademicki |                                                                                                                                 | <b>Cykl dydaktyczny</b><br>2023/2024<br><b>Kod przedmiotu</b><br>CIMAS.II4.15933.23<br><b>Języki wykładowe</b><br>polski<br><b>Obligatoryjność</b><br>Do wyboru<br><b>Blok zajęciowy</b><br>Przedmioty kierunkowe<br><b>Przedmiot powiązany z badaniami naukowymi</b><br>Tak |
| <b>Koordynator przedmiotu</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Juliusz Dąbrowa                                                                                                                 |                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| <b>Prowadzący zajęcia</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Juliusz Dąbrowa, Marek Zajusz, Andrzej Mikuła                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| <b>Okres</b><br>Semestr 3                                                                                                                                                                                                                                                                                               | <b>Forma zaliczenia</b><br>Zaliczenie<br><br><b>Forma prowadzenia i godziny zajęć</b><br>Wykład: 10<br>Ćwiczenia projektowe: 30 | <b>Liczba punktów ECTS</b><br>4                                                                                                                                                                                                                                              |

### Cele kształcenia dla przedmiotu

|    |                                                                                                                                       |
|----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| C1 | Zapoznanie studentów z podstawowymi narzędziami informatycznymi wykorzystywanymi w projektowaniu materiałów.                          |
| C2 | Wskazanie studentom zależności pomiędzy strukturą, składem i właściwościami w złożonych układach o charakterze metalicznym i jonowym. |
| C3 | Uświadomienie słuchaczom możliwości teoretycznych metod modelowania w kontekście projektowania materiałów pod konkretne zastosowania. |

## Efekty uczenia się dla przedmiotu

| Kod                                                     | Efekty w zakresie                                                                                                                                                                  | Kierunkowe efekty uczenia się | Metody weryfikacji                                                                                 |
|---------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Wiedzy - Student zna i rozumie:</b>                  |                                                                                                                                                                                    |                               |                                                                                                    |
| W1                                                      | zaawansowane modele termodynamiczne wykorzystywane w inżynierii materiałowej oraz rozumie ich praktyczne implikacje.                                                               | IMT2A_W03                     | Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie, Wynik testu zaliczeniowego |
| W2                                                      | zależności pomiędzy strukturą i właściwościami ciał stałych.                                                                                                                       | IMT2A_W03                     | Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie, Wynik testu zaliczeniowego |
| W3                                                      | teoretyczne podstawy metod obliczeniowych wykorzystywanych w projektowaniu struktury i właściwości ciał stałych.                                                                   | IMT2A_W02                     | Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie, Wynik testu zaliczeniowego |
| <b>Umiejętności - Student potrafi:</b>                  |                                                                                                                                                                                    |                               |                                                                                                    |
| U1                                                      | przeprowadzić obliczenia termodynamiczne dla układów metalicznych z wykorzystaniem pakietu obliczeniowego bazującego na formalizmie typu CALPHAD (CALculations of PHase Diagrams). | IMT2A_U02                     | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie     |
| U2                                                      | przeprowadzić podstawowe obliczenia typu ab initio uwzględniające specyfikę układów wieloskładnikowych.                                                                            | IMT2A_U02                     | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie     |
| U3                                                      | dokonać interpretacji wyników obliczeniowych w kontekście otrzymywania materiałów o danej strukturze i właściwościach.                                                             | IMT2A_U01, IMT2A_U04          | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie     |
| <b>Kompetencji społecznych - Student jest gotów do:</b> |                                                                                                                                                                                    |                               |                                                                                                    |
| K1                                                      | zastosowania nowych narzędzi teoretycznych w celu podniesienia poziomu zrozumienia i jakości prowadzonych badań.                                                                   | IMT2A_K01                     | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie projektu, Sprawozdanie                        |
| K2                                                      | wykorzystania nabytej wiedzy w celu nawiązywania współpracy pozwalającej na rozwiązywanie interdyscyplinarnych zagadnień badawczych.                                               | IMT2A_K02                     | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie projektu, Sprawozdanie                        |

## Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

Przedmiot umożliwia zapoznanie się z podstawami teoretycznych metod wykorzystywanych w projektowaniu struktury i właściwości ciał stałych oraz możliwościami ich praktycznej implementacji w wybranych pakietach obliczeniowych.

## Nakład pracy studenta

| Rodzaje zajęć studenta                                            | Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane aktywności |
|-------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------|
| Wykład                                                            | 10                                                               |
| Ćwiczenia projektowe                                              | 30                                                               |
| Dodatkowe godziny kontaktowe                                      | 5                                                                |
| Przygotowanie do zajęć                                            | 15                                                               |
| Przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania | 10                                                               |
| Samodzielne studiowanie tematyki zajęć                            | 28                                                               |
| Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe                                | 2                                                                |
|                                                                   |                                                                  |
| <b>Łączny nakład pracy studenta</b>                               | <b>Liczba godzin</b><br>100                                      |
| <b>Liczba godzin kontaktowych</b>                                 | <b>Liczba godzin</b><br>40                                       |

\* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

## Treści programowe

| Lp. | Treści programowe                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Efekty uczenia się dla przedmiotu | Formy prowadzenia zajęć |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|-------------------------|
| 1.  | <p>1. Termodynamika układów metalicznych</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Podstawowe parametry termodynamiczne</li> <li>• Entalpia swobodna Gibbsa w metalicznych układach wieloskładnikowych – modele</li> <li>• Roztwory stałe vs układy uporządkowane</li> <li>• Układy wielofazowe</li> <li>• Formalizm CALPHAD</li> </ul> <p>2. Termodynamika układów jonowych</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Entalpia swobodna Gibbsa w jonowych układach wieloskładnikowych – modele</li> <li>• Mieszanie w jonowych układach złożonych</li> <li>• Podstawy termodynamiki defektów punktowych</li> </ul> <p>3. Struktura elektronowa materiałów</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Elementy fizycznych podstaw metod ab initio</li> <li>• Podstawowe przybliżenia i metody wykorzystywane w obliczeniach układów wieloskładnikowych</li> <li>• Struktura elektronowa i jej wpływ na właściwości materiałów</li> <li>• Deskryptory aktywności katalitycznej</li> </ul> | W1, W2, W3, U3                    | Wykład                  |
| 2.  | <p>Obliczenia w układach metalicznych</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Thermocalc – obsługa, obliczania typu “single point equilibrium”</li> <li>• Diagramy fazowe 2-składnikowe – tworzenie, interpretacja, obliczenia</li> <li>• Diagramy fazowe 3-składnikowe – tworzenie, interpretacja, obliczenia</li> <li>• Diagramy wieloskładnikowe – obliczenia zaawansowane (1-axis calculations)</li> <li>• Diagramy wieloskładnikowe - projektowanie zaawansowanych stopów metalicznych</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | U1, U3, K1, K2                    | Ćwiczenia projektowe    |

| Lp. | Treści programowe                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | Efekty uczenia się dla przedmiotu | Formy prowadzenia zajęć |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|-------------------------|
| 3.  | <p>Obliczenia w układach jonowych</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Obsługa programów dedykowanych do wizualizacji struktur krystalicznych, tworzenie struktur wejściowych, wizualizacja układów prostych i wieloskładnikowych</li> <li>• Podstawowa obsługa programów do obliczeń ab initio, przygotowanie plików wejściowych dla układów prostych i wieloskładnikowych</li> <li>• Ewaluacja plików wyjściowych, opracowanie danych strukturalnych, wizualizacja struktur zrelaksowanych, przygotowanie plików wejściowych do obliczeń struktury elektronowej</li> <li>• Stabilność energetyczna układów, defekty, domieszki i ich energie formowania</li> <li>• Struktura elektronowa – przerwa wzbroniona, typ przewodnictwa, wyznaczanie środka ciężkości pasm i korelacja z aktywnością katalityczną, parametry transportowe</li> </ul> | W3, U2, U3, K1, K2                | Ćwiczenia projektowe    |

## Informacje rozszerzone

### Metody i techniki kształcenia :

Mini wykład, Dyskusja, Studium przypadku (ang. case study), Metoda problemowa (ang. Problem Based Learning), Metoda projektowa (ang. Project Based Learning), Demonstracja, instruktaż

| Rodzaj zajęć         | Metody zaliczenia                                                                              | Warunki zaliczenia przedmiotu                                                                                                                                         |
|----------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Wykład               | Aktywność na zajęciach, Wynik testu zaliczeniowego                                             | Na koniec semestru studenci piszą kolokwium zaliczeniowe obejmujące pytania zamknięte (test wyboru) i otwarte.                                                        |
| Ćwiczenia projektowe | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Wykonanie projektu, Sprawozdanie | W ramach poszczególnych bloków zajęć laboratoryjnych studenci będą realizowali projekty, które następnie poddawane będą ocenie w oparciu o przygotowane sprawozdania. |

### Dodatkowy opis

Zaliczenie przedmiotu wymaga zarówno znajomości zagadnień teoretycznych, jak i praktycznych aspektów związanych z wykorzystaniem pakietów obliczeniowych.

### Warunki i sposób zaliczenia poszczególnych form zajęć, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu

W ramach przedmiotu student uzyskuje 3 oceny, po jednej z każdego bloku:

Blok wykładowy - zaliczenie bloku odbywa się na koniec semestru, podstawą dopuszczenia do zaliczenia jest uzyskanie pozytywnej oceny z obu bloków laboratoryjnych.. Test zaliczeniowy obejmuje całość materiału realizowanego na przedmiocie. Na test składają się zarówno pytania o charakterze zamkniętym, jak i otwartym.

Blok laboratoryjny o materiałach metalicznych - w ramach zajęć laboratoryjnych każdy student otrzyma do realizacji projekt, sprawdzający umiejętności zdobyte podczas zajęć. Ocena zostaje wystawiona w oparciu o sprawozdanie z projektu,

dostarczone prowadzącemu we wcześniej ustalonym terminie.

Blok laboratoryjny o materiałach jonowych - w ramach zajęć laboratoryjnych każdy student otrzyma do realizacji projekt, sprawdzający umiejętności zdobyte podczas zajęć. Ocena zostaje wystawiona w oparciu o sprawozdanie z projektu, dostarczone prowadzącemu we wcześniej ustalonym terminie.

Student ma prawo do dwóch terminów poprawkowych w przypadku testu zaliczeniowego z części wykładowej. W przypadku części laboratoryjnych, ze względu na specyfikę zajęć, zasady dotyczące terminów poprawkowych są ustalane indywidualnie z prowadzącymi.

### **Sposób obliczania oceny końcowej**

O1, O2, O3 - oceny otrzymane kolejno z: testu zaliczeniowego z części wykładowej, bloku laboratoryjnego o materiałach metalicznych, bloku laboratoryjnego o materiałach jonowych

OK - Ocena końcowa z przedmiotu:  $OK = 0.4 \cdot O1 + 0.3 \cdot O2 + 0.3 \cdot O3$

Ocena końcowa z przedmiotu w zależności od obliczonej wartości OK:

$3.0 \leq OK \leq 3.25$  - 3.0

$3.26 \leq OK \leq 3.75$  - 3.5

$3.76 \leq OK \leq 4.25$  - 4.0

$4.26 \leq OK \leq 4.75$  - 4.5

$4.75 < OK$  - 5.0

### **Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach**

Ze względu na specyfikę zajęć laboratoryjnych, sposób i termin odrabiania zaległości jest indywidualnie ustalany z prowadzącym zajęcia.

## **Wymagania wstępne i dodatkowe**

Znajomość podstawowych struktur ciał stałych.

Znajomość podstaw termodynamiki ciała stałego.

Znajomość podstaw rachunku różniczkowego.

### **Zasady udziału w poszczególnych zajęciach, ze wskazaniem, czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa**

Wykład: Studenci uczestniczą w zajęciach poznając kolejne treści, zgodne z sylabusem przedmiotu. Do każdego z wykładów udostępnione zostaną dodatkowe materiały dydaktyczne, utrwalające i poszerzające wiedzę przedstawioną w trakcie zajęć. Studenci winni na bieżąco zadawać pytania i wyjaśniać wątpliwości. Rejestracja audiowizualna wykładu wymaga zgody prowadzącego.

Ćwiczenia laboratoryjne: Studenci wykonują ćwiczenia laboratoryjne zgodnie z materiałami uprzednio udostępnionymi przez prowadzącego oraz jego poleceniami w trakcie zajęć. Student zobowiązany jest do przygotowania swojego stanowiska pracy poprzez zainstalowanie i konfigurację wymaganego oprogramowania, zgodnie z uprzednimi zaleceniami prowadzącego.

Obecność na zajęciach laboratoryjnych jest obowiązkowa. Rejestracja audiowizualna zajęć laboratoryjnych wymaga zgody prowadzącego.

## Literatura

### Obowiązkowa

1. N. Saunders, A.P. Miodownik, "CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide", Pergamon, 1998
2. N.M. Harrison, "An Introduction to Density Functional Theory", Nato Science Series Sub Series III Computer and Systems Sciences 187 (2003) 45-70.

### Dodatkowa

1. S.J. McCormack, A. Navrotsky, "Thermodynamics of high entropy oxides", Acta Materialia 202 (2021) 1-21
2. D.B. Miracle, O.N. Senkov, "A critical review of high entropy alloys and related concepts", Acta Materialia 122 (2017) 448-511
3. Y. Lee, J. Kleis, J. Rossmeisl, Y. Shao-Horn, D. Morgan, "Prediction of solid oxide fuel cell cathode activity with first-principles descriptors", Energy & Environmental Science 4 (2011) 3966
4. W.T. Hong, R.E. Welsch, Y. Shao-Horn, "Descriptors of Oxygen-Evolution Activity for Oxides: A Statistical Evaluation", The Journal of Physical Chemistry C 120 (2016) 78-86
5. N. Argaman, G. Makov, "Density Functional Theory: an introduction", American Journal of Physics 68 (2000) 69
6. L. Piel, "Idee chemii kwantowej", Warszawa, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2006

## Badania i publikacje

### Badania

1. Projektowanie struktury i właściwości wieloskładnikowych materiałów metalicznych.
2. Projektowanie struktury i właściwości wieloskładnikowych materiałów jonowych.

### Publikacje

1. O.N. Senkov, J.D. Miller, D.B. Miracle, C. Woodward., "Accelerated exploration of multi-principal element alloys with solid solution phase", Nature Communications 6 (2015) 6529 2. U.R. Kattner, "The thermodynamic modeling of multicomponent phase equilibria", JOM 49 (1997) 14 3. M. Zajusz, M. Jawańska, J. Dąbrowa, K. Berent, G. Cieślak, T. Kulik, K. Mroczka, "Evaluation of phase stability and diffusion kinetics in novel BCC-structured high entropy alloys", Materials Research Letters 10 (2022) 556-565
1. W.T. Hong, R.E. Welsch, Y. Shao-Horn, "Descriptors of Oxygen-Evolution Activity for Oxides: A Statistical Evaluation", The Journal of Physical Chemistry C 120 (2016) 78-86 2. Y. Lee, J. Kleis, J. Rossmeisl, Y. Shao-Horn, D. Morgan, "Prediction of solid oxide fuel cell cathode activity with first-principles descriptors", Energy & Environmental Science 4 (2011) 3966 3. A. Mikuła, J. Dąbrowa, M. Kubowicz, J. Cieślak, W. Lach, M. Kożusznik, M. Smiałkowski, U.P. Apfel, "Synthesis, properties and catalytic performance of the novel, pseudo-spinel, multicomponent transition-metal selenides", Journal of Materials Chemistry A 11 (2023) 5337 4. J. Cieślak, M. Reissner, K. Berent, J. Dąbrowa, M. Stygar, M. Moździerz, M. Zajusz, "Magnetic properties and ionic distribution in high entropy spinels studied by Mossbauer and ab initio methods", Acta Materialia 206 (2021) 116600

## Kierunkowe efekty uczenia się

| Kod       | Treść                                                                                                                                                                                                                                              |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| IMT2A_K01 | Ma świadomość ciągłego dokształcania się i podnoszenia swoich kwalifikacji zawodowych i społecznych. Potrafi zrozumiale przekazywać wiedzę i jasno wyrażać opinie w dziedzinie inżynieria materiałowa.                                             |
| IMT2A_K02 | Posiada umiejętność kreatywnego i przedsiębiorczego działania, z pełną świadomością odpowiedzialności w realizacji projektów samodzielnych, jak i grupowych, posiada umiejętności kierowania zespołem.                                             |
| IMT2A_U01 | Potrafi korzystać z wiedzy literaturowej oraz posiada umiejętności korzystania z baz danych i innych źródeł. Potrafi na podstawie uzyskanych informacji dokonać analizy oraz interpretacji, zakończonej uzasadnionymi wnioskami i oceną krytyczną. |
| IMT2A_U02 | Potrafi dokonać właściwego wyboru narzędzi informatycznych w celu rozwiązania problemu technicznego.                                                                                                                                               |
| IMT2A_U04 | Potrafi dokonać właściwego doboru metod i narzędzi niezbędnych w rozwiązaniu typowych zadań z dziedziny inżynierii materiałowej, opierając się na optymalnym doborze materiałów i procesów wytwórczych.                                            |
| IMT2A_W02 | Ma pogłębioną wiedzę z zakresu metod numerycznych, jak i narzędzi obliczeniowych stanowiących podstawę współczesnej analizy wyników eksperymentalnych oraz niezbędnych w projektowaniu nowych materiałów i modelowaniu procesów.                   |
| IMT2A_W03 | Ma pogłębioną wiedzę o teoretycznej stronie inżynierii materiałowej oraz posiada poszerzoną wiedzę w dziedzinie projektowania złożonej struktury i właściwości użytkowych materiałów wraz z modelowaniem zachodzących procesów.                    |