

POLITECHNIKA KRAKOWSKA IM. TADEUSZA KOŚCIUSZKI

KARTA PRZEDMIOTU

obowiązuje studentów rozpoczynających studia w roku akademickim 2016/2017

Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej

Kierunek studiów: Nanotechnologie i Nanomateriały

Profil: Ogólnoakademicki

Forma studiów: stacjonarne

Kod kierunku: N

Stopień studiów: I

Specjalności: Technologie Nanomateriałowe

1 INFORMACJE O PRZEDMIOCIE

| | |
|---|--|
| NAZWA PRZEDMIOTU | NANO-1_25 Modelowanie molekularne nanostruktur |
| NAZWA PRZEDMIOTU W JĘZYKU ANGIELSKIM | Molecular modelling of nanostructures |
| KOD PRZEDMIOTU | WITCh NANO oIS C25 16/17 |
| KATEGORIA PRZEDMIOTU | Przedmioty kierunkowe |
| LICZBA PUNKTÓW ECTS | 2.00 |
| SEMESTRY | 5 |

2 RODZAJ ZAJĘĆ, LICZBA GODZIN W PLANIE STUDIÓW

| SEMESTR | WYKŁADY | ĆWICZENIA | LABORATORIUM | LABORATORIUM KOMPUTERO- WE | PROJEKT | SEMINARIUM |
|---------|---------|-----------|--------------|----------------------------------|---------|------------|
| 5 | 15 | 0 | 0 | 15 | 0 | 0 |

3 CELE PRZEDMIOTU

Cel 1 Zapoznanie studentów z możliwościami zastosowania nowoczesnych metod chemii teoretycznej w zakresie modelowania molekularnego, w tym modelowania materiałów, nanostruktur i katalizatorów

4 WYMAGANIA WSTĘPNE W ZAKRESIE WIEDZY, UMIEJĘTNOŚCI I INNYCH KOMPETENCJI

1 Zaliczony kurs Podstawy chemii

2 Zaliczony kurs Chemia fizyczna

5 EFEKTY KSZTAŁCENIA

EK1 Wiedza Ogólna znajomość najważniejszych metod chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym

EK2 Wiedza Znajomość metod modelowania materiałów

EK3 Umiejętności Umiejętność modelowania molekularnego prostych układów

EK4 Umiejętności Umiejętność wykonania prostych obliczeń metodami chemii kwantowej

6 TREŚCI PROGRAMOWE

| WYKŁADY | | |
|-----------|---|------------------|
| LP | TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH | LICZBA GODZIN |
| W1 | Ogólne wprowadzenie do zagadnień modelowania molekularnego. Obliczenia statyczne i dynamiczne. Oprogramowanie stosowane w obliczeniach. | 2 |
| W2 | Przegląd metod chemii teoretycznej: mechanika molekularna, metody ab initio, metody półempiryczne, teoria funkcjonału gęstości. | 4 |
| W3 | Teoretyczne przewidywanie właściwości substancji oraz reaktywności. | 1 |
| W4 | Modele klasterowe oraz periodyczne. Metody hybrydowe (QM/MM, QM/QM) i ich zastosowanie w modelowaniu materiałów. | 3 |
| W5 | Przykłady modelowania materiałów, nanostruktur i katalizatorów. Teoretyczne badania procesów katalitycznych. | 5 |

| LABORATORIUM KOMPUTEROWE | | |
|--------------------------|---|------------------|
| LP | TEMATYKA ZAJĘĆ OPIS SZCZEGÓŁOWY BLOKÓW TEMATYCZNYCH | LICZBA GODZIN |
| K1 | Modelowanie molekularne wybranych układów: przygotowanie plików wejściowych, uruchomienie obliczeń z zastosowaniem specjalistycznego oprogramowania, wizualizacja i interpretacja uzyskanych wyników. | 15 |

7 NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE

N1 Wykłady

N2 Prezentacje multimedialne

N3 Dyskusja

N4 Konsultacje

N5 Ćwiczenia laboratoryjne

8 OBCIĄŻENIE PRACĄ STUDENTA

| FORMA AKTYWNOŚCI | ŚREDNIA LICZBA GODZIN NA ZREALIZOWANIE AKTYWNOŚCI |
|--|---|
| Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim, w tym: | |
| Godziny wynikające z planu studiów | 30 |
| Konsultacje przedmiotowe | 1 |
| Egzaminy i zaliczenia w sesji | 1 |
| Godziny bez udziału nauczyciela akademickiego wynikające z nakładu pracy studenta, w tym: | |
| Przygotowanie się do zajęć, w tym studiowanie zalecanej literatury | 12 |
| Opracowanie wyników | 6 |
| Przygotowanie raportu, projektu, prezentacji, dyskusji | 10 |
| SUMARYCZNA LICZBA GODZIN DLA PRZEDMIOTU WYNIKAJĄCA Z CAŁEGO NAKŁADU PRACY STUDENTA | 60 |
| SUMARYCZNA LICZBA PUNKTÓW ECTS DLA PRZEDMIOTU | 2.00 |

9 SPOSOBY OCENY

OCENA PODSUMOWUJĄCA

P1 Test

P2 Sprawozdanie z ćwiczenia laboratoryjnego

P3 Zaliczenie ustne

P4 Zaliczenie pisemne

KRYTERIA OCENY

| EFEKT KSZTAŁCENIA 1 | |
|---------------------|--|
| NA OCENĘ 2.0 | Student nie zna metod chemii teoretycznej stosowanych w modelowaniu molekularnym |
| NA OCENĘ 3.0 | Student potrafi wymienić tylko nazwy najważniejszych metod chemii teoretycznej |

| | |
|---------------------|---|
| NA OCENĘ 3.5 | Student zna nazwy najważniejszych metod, orientuje się w ich możliwościach zastosowań |
| NA OCENĘ 4.0 | Student zna nazwy najważniejszych metod, w niewielkim stopniu rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań |
| NA OCENĘ 4.5 | Student zna nazwy najważniejszych metod, dosyć dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań |
| NA OCENĘ 5.0 | Student zna nazwy najważniejszych metod, bardzo dobrze rozumie ich podstawy teoretyczne, orientuje się w ich dokładności oraz możliwościach zastosowań |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 2 | |
| NA OCENĘ 2.0 | Student nie zna metod modelowania materiałów |
| NA OCENĘ 3.0 | Student potrafi wymienić tylko nazwy metod |
| NA OCENĘ 3.5 | Student zna nazwy metod oraz w niewielkim zakresie ich podstawowe cechy |
| NA OCENĘ 4.0 | Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy oraz ich najważniejsze wady i zalety |
| NA OCENĘ 4.5 | Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy, wady i zalety oraz orientuje się w możliwościach zastosowania |
| NA OCENĘ 5.0 | Student zna nazwy metod, ich podstawowe cechy, wady i zalety, orientuje się w możliwościach zastosowania oraz dobrze rozumie podstawy teoretyczne wszystkich tych zagadnień |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 3 | |
| NA OCENĘ 2.0 | Student nie nabył w ogóle umiejętności modelowania molekularnego prostych układów |
| NA OCENĘ 3.0 | Student nabył umiejętność modelowania molekularnego w stopniu dostatecznym |
| NA OCENĘ 3.5 | Student nabył umiejętność modelowania molekularnego w stopniu dosyć dobrym |
| NA OCENĘ 4.0 | Student nabył umiejętność modelowania molekularnego w stopniu dobrym |
| NA OCENĘ 4.5 | Student nabył umiejętność modelowania molekularnego w stopniu ponad dobrym |
| NA OCENĘ 5.0 | Student nabył umiejętność modelowania molekularnego w stopniu bardzo dobrym |
| EFEKT KSZTAŁCENIA 4 | |
| NA OCENĘ 2.0 | Student nie nabył w ogóle umiejętności wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych |
| NA OCENĘ 3.0 | Student nabył umiejętność wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu dostatecznym |
| NA OCENĘ 3.5 | Student nabył umiejętność wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu dosyć dobrym |

| | |
|--------------|---|
| NA OCENĘ 4.0 | Student nabył umiejętność wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu dobrym |
| NA OCENĘ 4.5 | Student nabył umiejętność wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu ponad dobrym |
| NA OCENĘ 5.0 | Student nabył umiejętność wykonywania prostych obliczeń kwantowochemicznych w stopniu bardzo dobrym |

10 MACIERZ REALIZACJI PRZEDMIOTU

| EFEKT KSZTAŁCENIA | ODNIESIENIE DANEGO EFEKTU DO SZCZEGÓŁOWYCH EFEKTÓW ZDEFINIOWANYCH DLA PROGRAMU | CELE PRZEDMIOTU | TREŚCI PROGRAMOWE | NARZĘDZIA DYDAKTYCZNE | SPOSOBY OCENY |
|-------------------|--|-----------------|----------------------|-----------------------|---------------|
| EK1 | K1_W02 K1_W04 | Cel 1 | W1 W2 W3 W5 K1 | N1 N2 N3 N4 N5 | P1 P2 P3 P4 |
| EK2 | K1_W02 K1_W04 | Cel 1 | W1 W4 W5 K1 | N1 N2 N3 N4 N5 | P1 P2 P3 P4 |
| EK3 | K1_U07 | Cel 1 | W1 W2 W3 W4 W5 K1 | N1 N2 N3 N4 N5 | P1 P2 P3 P4 |
| EK4 | K1_U07 | Cel 1 | W1 W2 W3 W4 W5 K1 | N1 N2 N3 N4 N5 | P1 P2 P3 P4 |

11 WYKAZ LITERATURY

LITERATURA PODSTAWOWA

- [1] | **F. Jensen** — *Introduction to Computational Chemistry*, , 2007, Wiley
- [2] | **K. I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori** — *Computational Chemistry and Molecular Modeling*, , 2008, Springer
- [3] | **C. J. Cramer** — *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models*, , 2004, Wiley

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- [1] | **L. Pielą** — *Idee chemii kwantowej*, Warszawa, 2005, PWN
- [2] | **W. Kołos, J. Sadlej** — *Atom i cząsteczka*, Warszawa, 1998, WNT
- [3] | **W. Kołos** — *Chemia kwantowa*, Warszawa, 1986, PWN

LITERATURA DODATKOWA

[1] Artykuły naukowe związane z modelowaniem molekularnym materiałów

12 INFORMACJE O NAUCZYCIELACH AKADEMICKICH**OSOBA ODPOWIEDZIALNA ZA KARTĘ**

dr hab. inż. prof. PK Jarosław Handzlik (kontakt: jhandz@pk.edu.pl)

OSOBY PROWADZĄCE PRZEDMIOT

1 dr hab. inż. prof. PK Jarosław Handzlik (kontakt:)

13 ZATWIERDZENIE KARTY PRZEDMIOTU DO REALIZACJI

(miejsowość, data)

(odpowiedzialny za przedmiot)

(dziekan)

PRZYJMUJĘ DO REALIZACJI (data i podpisy osób prowadzących przedmiot)

.....